



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DIEGO RABELO DA COSTA

ANÉIS QUÂNTICOS SEMICONDUTORES IDEAIS

FORTALEZA

2011

DIEGO RABELO DA COSTA

ANÉIS QUÂNTICOS SEMICONDUCTORES IDEAIS

Dissertação submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias

Co-orientador:

Dr. Andrey Chaves

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
MESTRADO EM FÍSICA

FORTALEZA

2011

C871a

Costa, Diego Rabelo da

Anéis quânticos semicondutores ideais/ Diego Rabelo da Costa. - Fortaleza: [s.n.], 2011.

180 f.:il.color

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Ceará. Departamento de Física.

Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Gil de Aquino Farias.

Co-orientador: Dr. Andrey Chaves.

1. Semicondutores. 2. Heteroestruturas. 3. Anéis quânticos I. Título.

CDD 621.38152

DIEGO RABELO DA COSTA

ANÉIS QUÂNTICOS SEMICONDUTORES IDEAIS

Dissertação submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Aprovada em: 08/08/2011.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias
Departamento de Física – UFC
Orientador

Dr. Andrey Chaves
Departamento de Física – UFC
Co - orientador

Prof. Dr. João Milton Pereira Júnior
Departamento de Física – UFC

Prof. Dr. Teldo Anderson da Silva Pereira
Departamento de Física – UFMT

*Dedico este trabalho à minha família
e a todos os meus amigos.*

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço a Deus e à minha família, em especial aos meus pais *Manoel Gonçalves da Costa Neto* e *Maria Vilaneide Rabelo da Costa*, e aos meus irmãos *Thiago Rabelo* e *Thays Rabelo*, aos quais devo o que sou hoje e por haverem me concedido a oportunidade de estudar, por todo apoio e ajuda que me deram durante minha vida.

Gostaria de agradecer ao professor *Gil de Aquino Farias* pela dedicação e confiança depositadas em minha pessoa ao longo da realização deste trabalho e nos cursos de graduação e mestrado.

Agradeço ao meu co-orientador *Andrey Chaves* pela grande colaboração e por nossas discussões, que me levaram a inúmeros ensinamentos essenciais à elaboração da dissertação.

Sou grato ao professor *Robson Ferreira*, do Laboratoire Pierre Aigrain, Ecole Normale Supérieure, France, por ter colaborado com esse trabalho, dando grandes ideias para a realização do mesmo.

Aos membros da banca examinadora, os professores *João Milton* e *Teldo Anderson*, pela atenção, por comparecerem à defesa e por darem sugestões importantes para consolidação e aprimoramento da dissertação.

Tendo em vista minha formação acadêmica, agradeço as discussões e trocas de ideias a todos os professores do Departamento de Física da UFC, em especial *Josué Mendes*, *Renan Landim*, *Nilson Almeida*, *José Ramos*, *Ildede Guedes*, *André Auto*, *Murilo Pereira*, *Marcos Antônio*, *Jeanlex Soares*, *Eloneid Felipe*, *Antônio Gomes*, *Alejandro Ayala*, *Eduardo Bedê*, *Carlos Alberto*, *Wandemberg Paiva* e *Raimundo Nogueira*, por contribuírem diretamente ao meu progresso científico.

Certamente os méritos da minha formação são devidos também aos meus amigos,

alunos do curso de graduação e pós-graduação, pois sem o apoio deles eu não teria conseguido, em especial: *Abraão Cefas, Adriano Polegar, Bruno Gondim, Daniel Gomes, Daniel Marchesi, Davi Dantas, Davi Monteiro, Diego Lucena, Diego Franklin "UHUU", Diego Ximenes, Felipe Moreira, Francisco Arthur, Francisco Leandro, Heitor Credidio, Hygor Piaget, Hudson Pacheco, Igor de Brito, Jorge Roberto, Josias Valentin, Júlio César, Kauã Monteiro, Leandro Jader, Levi Leite, Rafael Alencar, Saulo Dantas, Saulo-Davi, Vagner Bessa.* Aos amigos do LSBD: *Enedilton, Felipe Munarin, Francisco Florêncio, Francisco Neto, Francisco Wellery, Heitor Alves, Ítalo Pereira, João Cláudio, João Philipe, Jorge André, Jorge Kapuan, Jorge Luiz, Jusciane da Costa, Luci Pinheiro, Marcelo Montanha, Thiago de Melo, Sílvia Helena.*

A todos os funcionários do Departamento de Física da UFC.

Ao CNPq e à CAPES pelo suporte financeiro.

Enfim, agradeço a todos os que me ajudaram, direta ou indiretamente, para a elaboração e conclusão deste trabalho.

*“A ciência serve para nos dar uma ideia
de quão extensa é a nossa ignorância.”*

Félicité Robert de Lamennais

Resumo

Nos últimos anos, numerosos avanços alcançados nas técnicas de crescimento de materiais deram origem à formação de várias heteroestruturas de semicondutores, onde se podem confinar elétrons e buracos em uma ou mais direções, através de barreiras de potencial. Muitos pesquisadores recentemente têm estudado estruturas de baixas dimensionalidades, tais como pontos e fios quânticos, devido à sua importância em inúmeras aplicações tecnológicas em dispositivos opto-eletrônicos como, por exemplo, LASERS, sensores biológicos, diodos e transistores. Um exemplo interessante que é alvo de estudo nesse trabalho é a estrutura chamada anel quântico, uma estrutura de confinamento tridimensional obtida após um processo de *annealing* no crescimento de pontos quânticos.

No estudo das propriedades opto-eletrônicas de anéis quânticos, é de grande importância calcular os níveis de energia dos portadores de carga e as funções de onda a fim de analisar os autoestados do sistema. Desse modo, resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo para elétrons confinados em um anel quântico semicondutor na presença de um campo magnético, perpendicular ao plano do anel, utilizando a aproximação da massa efetiva. Sob algumas aproximações, consideramos que o confinamento dentro da região do anel é muito forte, tal que o problema é reduzido à variável angular, onde a largura e altura contribuem somente com termos constantes para a energia total. Avaliamos numericamente e analiticamente o problema do anel na ausência de qualquer força externa, obtendo o Efeito Aharonov-Bohm, no qual o espectro de energia oscila periodicamente com a variação do campo magnético.

Estudamos também os efeitos de potenciais perturbativos no espectro de energia de anéis quânticos. Primeiramente, consideramos o caso de um potencial gerado pela aplicação de um campo elétrico no plano do anel. Encontramos soluções analíticas e numéricas para o problema do anel com e sem um campo magnético axial. Mostramos que a presença de campo elétrico ergue a degenerescência angular dos estados de energia do elétron, suprimindo as oscilações Aharonov-Bohm para os níveis mais baixos de energia. Investigamos também as influências no espectro de energia devido à presença de uma ou mais impurezas positivas localizadas de maneira simétrica e assimetricamente ao longo do anel. Para N impurezas igualmente espaçadas, observamos as oscilações Aharonov-Bohm para os estados de menor energia e a formação de sub-bandas de energia compostas por N estados, enquanto para sistemas assimétricos o efeito não foi visto e os estados que formam as sub-bandas não mais se cruzam. De maneira análoga ao caso das impurezas, vimos que a presença de superredes de poços de potenciais quadrados acopla os estados de energia

em sub-bandas, devido à simetria rotacional do anel quântico. Analisamos também o comportamento das “minibandas”, formadas pelos estados ligados da superrede, com relação ao confinamento do potencial e comparamos o espectro de energia com a variação do campo magnético para um e mais poços quadrados. Por fim, discutimos os efeitos no espectro de energia do exciton no anel quântico devido à presença de um campo elétrico e de uma impureza negativa. Mostramos que os estados de mais baixa energia do exciton não oscilam quando consideramos o potencial coulombiano de interação elétron-buraco, mas a presença de uma impureza em certas localizações ergue as oscilações Aharonov-Bohm, que podem ser suprimidas pela adição do campo elétrico no plano do anel. Expomos assim o comportamento instável das oscilações nas energias excitônicas na presença de perturbações.

Abstract

In recent years, the advances in the materials growth techniques lead to the formation of several semiconductor heterostructures, where electrons and holes can be confined in one or more directions by potential barriers. Lately, many researchers have studied low dimensional structures such as quantum dots and quantum wires, due to their importance and untold technological applications in opto-electronic devices such as LASERS, biological sensors, diode and transistors. An interesting example is the quantum ring, which is the subject of study in this work. This is a three-dimensional confinement structure obtained after an *annealing* process in quantum dots growth.

In the study of opto-electronic properties of quantum rings it is quite important to calculate the charge carriers energy levels and wave functions in order to analyze the eigenstates of the system. Therefore, we solve the time-independent Schrödinger equation for electrons confined in semiconductor quantum rings in the presence of a magnetic field perpendicular to the plane of the ring using the effective mass approximation. Under some approximations, we consider that the confinement inside the quantum ring region is very strong, so that the problem is reduced to the angular variable, where the width and the height contribute only with constant terms to the total energy. We investigate numerically and analytically the problem of a ring in the absence of any external force, which leads to the Aharonov-Bohm effect, where the energy spectrum oscillates periodically as the magnetic field varies.

We also study the effects of perturbative potentials on the energy spectrum of quantum rings. Firstly, we consider the case of a potential due to an electric field in the plane of the ring. We find analytical and numerical solutions to the problem with and without an axial magnetic field. We show that the presence of an electric field lifts the angular degeneracy of the electron's energy state, suppressing the Aharonov-Bohm oscillations for the lower energy levels. We also investigate the influence on the energy spectrum due to the presence of one or more positive impurities arranged symmetrically and asymmetrically along the ring. For N impurities equally spaced, we observe Aharonov-Bohm oscillations for the lower energy states as well as the formation of subbands of energy, composed by N states, while for asymmetric systems the effect was not observed and the states that form the subbands no longer cross. Similarly to the case with impurities, we observe that the presence of superlattices of square potential wells groups the energy states in subbands due to the rotational symmetry of the quantum ring. We also analyze the behavior of "minibands" formed by the bound states in the superlattice with respect to the confinement

potential and we compare the energy spectrum with the variation of the magnetic field for one or more square wells. Finally we discuss the effects in the exciton energy spectrum due to the presence of an electric field and a negative impurity. We show that the lower energy states of the exciton do not oscillate when we consider the Coulomb interaction potential between the electron and the hole, but the presence of an impurity in certain positions lifts the Aharonov-Bohm oscillations, which can be further suppressed when an electric field is added. So, we expose the instability of the Aharonov-Bohm oscillations of the excitonic energy against perturbations.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	p. 25
1.1	Um pouco de história: dispositivos semicondutores	p. 25
1.2	Estrutura de bandas	p. 29
1.2.1	Análise qualitativa	p. 29
1.2.2	O teorema de Bloch	p. 32
1.2.3	Condições de contorno de Born-Von Karman	p. 34
1.2.4	Formação das bandas de energia: os números n do teorema de Bloch	p. 36
1.2.5	Esquema de zona reduzida: primeira zona de Brillouin	p. 38
1.2.6	Modelo de Kronig-Penney	p. 41
1.3	Condutores, isolantes e semicondutores	p. 44
1.4	Massa efetiva	p. 47
1.5	Heteroestruturas	p. 51
1.6	Confinamento quântico	p. 54
1.7	Anéis quânticos	p. 56
1.8	Efeito Aharonov-Bohm	p. 59
1.9	Exciton em nanoestruturas	p. 64
1.10	Escopo do trabalho	p. 68

2 ANÉIS QUÂNTICOS IDEAIS	p. 70
2.1 Modelo teórico	p. 70
2.1.1 Algumas aproximações	p. 72
2.1.2 A invariância na escolha do <i>gauge</i>	p. 73
2.1.3 O Hamiltoniano efetivo do anel quântico ideal	p. 78
2.2 Solução de um anel quântico ideal na ausência de perturbação	p. 80
2.3 Perturbação: Algumas considerações	p. 83
2.3.1 Transformação de <i>gauge</i>	p. 83
2.4 Método numérico	p. 87
2.4.1 Técnica de discretização: solução unidimensional	p. 88
2.4.2 Numérico versus analítico	p. 93
3 EFEITOS DE IMPUREZAS E CAMPOS ELÉTRICOS SOBRE O ESPECTRO DE ENERGIA DE ANÉIS QUÂNTICOS	p. 95
3.1 Efeitos devido a campos elétricos no plano	p. 95
3.1.1 Campo magnético igual a zero	p. 96
3.1.2 Campo magnético diferente de zero	p. 99
3.2 Efeitos de impurezas	p. 100
3.3 Resultados e discussões	p. 103
4 POÇO QUÂNTICO SIMPLES E SUPERREDES EM ANÉIS QUÂNTICOS IDEAIS	p. 116
4.1 Modelo teórico	p. 116
4.2 Poços quânticos simples	p. 121
4.3 Superredes	p. 122
4.3.1 Com profundidades iguais	p. 122
4.3.2 Com profundidades aleatórias	p. 126
4.4 Resultados e discussões	p. 127

4.4.1	Poços quânticos simples	p.128
4.4.2	Superredes	p.132
4.4.2.1	Com profundidades iguais	p.132
4.4.2.2	Com profundidades aleatórias	p.138
5	EXCITONS EM ANÉIS QUÂNTICOS IDEAIS	p.145
5.1	Modelo teórico	p.145
5.2	Método numérico	p.155
5.3	Anel rugoso	p.156
5.4	Resultados e discussões	p.159
6	CONCLUSÕES GERAIS E PERSPECTIVAS	p.170
	Referências	p.175

Lista de Figuras

- 1 (a) Fotografia do primeiro transistor bipolar, conhecido como transistor de ponto de contato, criado em dezembro de 1947 na Bell Labs. (b) Fotografia dos inventores do transistor: John Bardeen (à esquerda), William Shockley (ao centro) e Walter Brattain (à direita) divulgada na capa da revista *Electronics* em setembro de 1948 com título *Crystal Triode* [5]. p. 27
- 2 (a) Fotografia de Jack S. Kilby, da empresa Texas Instruments (à esquerda), e Robert Noyce, da empresa Fairchild Semiconductor (à direita) [6]. (b) Fotografia do primeiro circuito integrado da história desenvolvido por Jack S. Kilby em 1958 [5]. p. 28
- 3 (a) Esquema de níveis de energia para dois átomos isolados. (b) Esquema de níveis de energia para os mesmos dois átomos em uma molécula diatômica. (c) Esquema de níveis de energia para quatro átomos do mesmo tipo em um cristal rudimentar unidimensional. Observe que o nível mais baixo não é desdobrado apreciavelmente porque as autofunções atômicas para esse nível não se superpõem de forma significativa [9]. p. 31
- 4 Formação de bandas de energia devido à aproximação para N átomos de sódio, cuja configuração eletrônica é $(1s^2)(2s^2)(2p^6)(3s)$, mostrando explicitamente o *gap* entre elas [7]. p. 32
- 5 Potencial periódico cristalino representado graficamente ao longo de uma linha de íons e ao longo de uma linha no meio de um plano de íons. Os círculos fechados são os sítios de íons de equilíbrio; as curvas sólidas fornecem o potencial ao longo da linha de íons; as curvas pontilhadas, o potencial ao longo de uma linha entre planos de íons; e as curvas tracejadas, o potencial de íons individuais isolados [11]. p. 33

6	Cristal finito em forma de paralelepípedo com 4 células na direção de cada vetor que compõe a célula unitária.	p. 35
7	Energias permitidas em função do vetor k , para uma rede unidimensional de periodicidade a . A linha tracejada é a energia para o caso de um elétron livre. As bandas de energia permitidas e proibidas resultantes aparecem à direita [9].	p. 37
8	Primeira zona de Brillouin para uma estrutura cúbica de face centrada para cristais tipo Si, GaAs, AlAs, ZnSe e outros. Os pontos marcados são dados na Tabela 1.	p. 38
9	Estrutura de banda de GaAs [12].	p. 39
10	(a) Os níveis de energia mostrados em um esquema de zona reduzida. (b) Repetição por todo o espaço k da primeira zona de Brillouin formando o esquema de zona repetida [11].	p. 40
11	(a) Ilustração do deslocamento das bandas na segunda zona de Brillouin de $\pm 2\pi/a$. (b) Esquema de bandas reduzidas à primeira zona, resultante desse deslocamento [7].	p. 40
12	Representação esquemática de (a) dois estados de energia ligados para um elétron em um poço de potencial isolado, (b) duas bandas de energia para um elétron em um conjunto de poços e barreiras periodicamente espaçados [14].	p. 41
13	Representação esquemática de um (a) cristal de parâmetro de rede a e (b) seu potencial real e aproximado pelo modelo de Kronig-Penney [9].	p. 42
14	Representação esquemática de um potencial periódico formado por poços de barreira finita.	p. 43
15	(a) Gráfico qualitativo mostrando o comportamento da quebra de degenerescência E como função do parâmetro Δ . (b) Curva de dispersão para a primeira zona de Brillouin.	p. 45

- 16 Esquema das bandas de valência e de condução de materiais semicondutores, isolantes e condutores, onde as regiões em cor cinza representam a ocupação de elétrons para o estado fundamental, $T = 0K$. Os materiais semicondutores possuem um *gap* de energia da ordem de $K_B T$, ao contrário dos isolantes, que tipicamente têm um *gap* muito maior que $K_B T$. Já os metais possuem a banda de condução semi-preenchidas à $0K$. p. 47
- 17 Representação esquemática das bandas de condução (BC) e de valência (BV). Para a banda de valência, apresentam-se as bandas para buracos pesados(HH, heavy hole) e leves(LH, light hole) [17]. p. 50
- 18 Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores com *gaps* diferentes, formando degraus de potencial para o elétron na banda de condução e para o buraco na banda de valência [19]. p. 52
- 19 Representação esquemática do potencial gerado por (a) uma heterojunção do tipo **A/B/A** entre dois semicondutores diferentes e (b) uma superrede de semicondutores **A** e **B** [19]. p. 52
- 20 Representação esquemática do alinhamento das bandas de condução e de valência gerado por uma heteroestrutura (a) Tipo-I e (b) Tipo-II [19]. p. 53
- 21 Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores diferentes: (a) formando um potencial de confinamento em um poço, (b) em um fio quântico e (c) em um ponto quântico. p. 53
- 22 Confinamento das heteroestruturas em relação à dimensionalidade, de um material bulk-3D (a) até o ponto quântico-0D (d), passando por um poço-1D (b) e um fio quântico-2D (c). p. 56
- 23 Representação do movimento de um portador no plano do poço, apresentando um diagrama esquemático das curvas de dispersão ($k_{x,y}$) no plano xy e estrutura das sub-bandas [19]. p. 57
- 24 Imagem de um ponto quântico InAs/GaAs, obtida por Microscopia de Força Atômica [17]. p. 57
- 25 (a), (b), (c) Imagens de Microscópio de Força Atômica ilustrando a evolução de um anel quântico de InGaN [32]. p. 58
- 26 Imagem de anéis quânticos In(Ga)As obtida por Microscopia de Força Atômica(AFM) [33]. p. 58

- 27 Esquema de um experimento de dupla fenda na presença de um solenóide longo (círculo cinza), que gera um campo magnético \vec{B} em seu interior. As linhas pontilhadas representam os caminhos pelos quais os elétrons passam, e as setas ao redor do solenóide representam a direção do potencial vetor, devido o campo magnético estar na direção perpendicular à folha, saindo da mesma. p. 62
- 28 (a) Representação esquemática de geração de excitons [19]. (b) Níveis de energia dos excitons em uma estrutura de bandas simples com *gap* direto, mostrando que os níveis excitônicos estão localizados abaixo da banda de condução [13]. p. 64
- 29 (a) Absorção de fótons em semicondutores de *gap* direto, mostrando o limiar de energia necessária para que aconteça a transição. (b) Transição eletrônica do topo da banda de valência para dois mínimos da banda de condução em semicondutores de *gap* indireto. A transição indireta envolve fônons e tem energia E_g . A transição direta tem energia $E_g + E'$ [7]. p. 65
- 30 (a) Representação esquemática mostrando os excitons de Frenkel e Wannier-Mott em uma estrutura cristalina [17, 63]. p. 67
- 31 Representação de um anel quântico (a) bidimensional (plano xy) (b) tridimensional com altura L_z , formado por *GaAs* na região do anel. . . p. 71
- 32 Representação esquemática do potencial do anel quântico na direção de ρ . p. 71
- 33 Representação esquemática da função de *Heaviside*, também chamada de função degrau. Ela é uma função descontínua de valor zero para argumento negativo, e 1 para argumento positivo. p. 72
- 34 Espectro de energia sob a influência do fluxo magnético, verificando o efeito Aharonov-Bohm. p. 82
- 35 Variação unidimensional ao longo do eixo z com passo h entre dois pontos adjacentes. p. 89
- 36 Espectro de energia de um anel quântico ideal sob influência de um campo magnético perpendicular ao plano do anel, onde se verifica o efeito Aharonov-Bohm, que foi calculado numericamente. p. 94

37	Representação da direção do campo elétrico no plano do anel, ao longo do eixo x	p.96
38	Gráfico mostrando a forma do potencial elétrico.	p.97
39	Representação da localização da impureza ionizada (a) vista do topo do anel, e (b) vista em perspectiva.	p.100
40	Representação da localização das impurezas espaçadas de maneira aleatória. O parâmetro w é o peso da aleatoriedade, representado pelo arco em azul na figura.	p.102
41	As localizações das cinco impurezas com pesos $w = 0, \pi/N, 2\pi/N$, respectivamente representadas pelos pontos pretos, vermelhos e azuis. O arco em azul delimita o intervalo máximo para o posicionamento da impureza ao se considerar o peso máximo $2\pi/N$	p.103
42	Variação do espectro de energia com a intensidade do campo elétrico, na ausência de campo magnético externo.	p.104
43	Módulo quadrado das funções de onda do elétron ($\Psi^*\Psi = \Psi ^2$) como função da coordenada angular θ , para os cinco primeiros estados, na ausência de campo magnético externo e considerando campo elétrico no plano do anel com diferentes intensidades.	p.105
44	Variação do espectro de energia com as intensidades do campo magnético e do campo elétrico em duas perspectivas diferentes para melhor visualização da supressão do efeito Aharonov-Bohm.	p.106
45	Espectro de energia como função do campo magnético em um anel quântico na presença de (a) uma e duas impurezas positivas (diametralmente opostas), (b) três impurezas positivas localizadas simétrica e assimetricamente.	p.107
46	Potencias para três impurezas localizadas simetricamente (vermelho) e assimetricamente (preto) ao longo do anel.	p.107
47	Espectro de energia como função do campo magnético em um anel quântico na presença de três, quatro e cinco impurezas positivas igualmente espaçadas, explicitando (a) a formação das sub-bandas compostas por N estados e (b) os $N + 1$ primeiros estados.	p.109

- 48 Espectro de energia como função do campo magnético em um anel quântico na presença de três, quatro e cinco impurezas localizadas aleatoriamente com um peso fixo, dado por $w = \pi/N$, explicitando (a) a formação das sub-bandas compostas por N estados e (b) os $N + 1$ primeiros estados. p. 110
- 49 Comportamento médio da influência do campo magnético sobre o espectro de energia de um anel quântico na presença de três, quatro e cinco impurezas localizadas aleatoriamente com um peso fixo, dado por $w = \pi/N$, obtido pela média de dez realizações distintas incluindo o desvio padrão, explicitando (a) a separação da sub-banda com os sucessivos níveis de energia e (b) os $N + 1$ primeiros estados. p. 112
- 50 Comportamento médio da influência do campo magnético sobre o espectro de energia de um anel quântico na presença de três, quatro e cinco impurezas localizadas aleatoriamente com um peso fixo, dado por $w = 2\pi/N$, obtido pela média de dez realizações distintas incluindo o desvio padrão, explicitando (a) a separação dos níveis sem formação de sub-bandas e (b) os $N + 1$ primeiros estados. p. 113
- 51 Espectro de energia como função do campo magnético e do peso da aleatoriedade na localização da impureza em um anel quântico na presença de três, quatro e cinco impurezas. p. 114
- 52 Módulo quadrado das funções de onda do elétron ($\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$) como função da coordenada angular θ , para os dez primeiros estados, na presença de três, quatro e cinco impurezas positivas localizadas (a) simétrica e (b) assimetricamente, de maneira aleatória com peso da aleatoriedade $w = 2\pi/N$, ao longo do anel. p. 115
- 53 Poço de potencial de largura θ_W e profundidade V_0 ao longo da direção angular do anel. p. 121
- 54 (a) Esboço de duas superredes com $N = 2$ e $N = 3$ poços de potenciais quânticos simples na direção angular do anel. (b) Potenciais das superredes com $N = 2$ e $N = 3$ poços, para o caso em que $V_0 = 100E_R$. p. 123
- 55 Os cem primeiros números aleatórios gerados com as sementes inteiras -37, 0 e 23. p. 127
- 56 Superrede de poços de potencial com profundidades aleatórias, formada assumindo $\theta_W = \theta_B = \theta_D/2$ e $\theta_D = 2\pi/N$ p. 127

- 57 Variação das autoenergias como função da profundidade do poço de potencial quadrado simples. p.128
- 58 Variação das energias com a largura angular do poço sem campo magnético com uma profundidade do potencial fixa e de valor $V_0 = 10E_R$ p.130
- 59 Influência do campo magnético sobre o espectro de energia do poço no anel. p.131
- 60 Relação de dispersão para (a) seis e (b) nove poços sem campo magnético com $\theta_W = \theta_B = \pi/N$ e $V_0 = 35E_R$ p.133
- 61 (a) Relação de dispersão para dez poços sem campo magnético no esquema de zona reduzida com $\theta_W = \pi/N$ e $V_0 = 35E_R$; (b) Banda ligada da relação de dispersão mostrada separadamente com os círculos vermelhos representando apenas os valores inteiros de k p.133
- 62 Comportamento dos estados ligados com relação ao confinamento do potencial para (a) oito, (b) dez e (c) dezesseis poços com $\theta_W = \pi/10$. A curva central com cor vermelha representa a solução para um poço quântico simples com a mesma largura angular $\theta_W = \pi/10$ p.134
- 63 Comportamento dos estados de energia com relação à profundidade do potencial para dezesseis poços, sendo o ponto de referência para as energias tomado no fundo dos poços. A curva central em cor azul representa a solução para um poço quântico simples com a mesma largura angular $\theta_W = \pi/10$. A linha pontilhada em cor verde representa a solução para o anel quântico ideal $E/E_R = n^2$. A seta em cor azul mostra a diminuição da largura da minibanda quando $V_0 \rightarrow \infty$ para os $N/2 + 1$ estados. p.136
- 64 Influência do campo magnético sobre o espectro de energia de uma superrede formada com (a) três, (b) quatro e (c) cinco poços com $\theta_W = \pi/N$ e $V_0 = 35E_R$ p.137
- 65 Variação dos estados ligados da superrede com o aumento das profundidades dos poços de potenciais para oito, dez e dezesseis poços, (a) com profundidades iguais e (b) com profundidades aleatórias, sem campo magnético com $\theta_W = \pi/10$ p.139

- 66 Comportamento da média e do desvio padrão para dez realizações feitas das variação dos níveis de energia da superrede com o aumento das profundidades dos poços de potenciais para (a) oito e (b) dez poços com profundidades aleatórias na ausência de campo magnético tomando $\theta_W = \pi/10$ p. 140
- 67 Esboço dos potenciais das superredes para (a) $N = 3$, (b) $N = 4$ e (c) $N = 5$ poços com profundidades iguais (pontilhado em preto) e aleatórias (pontilhado em vermelho). p. 142
- 68 Influência do campo magnético sobre o espectro de energia para superredes formadas com poços de potenciais para três, quatro e cinco poços, (a) com profundidades iguais e (b) com profundidades aleatórias, com $\theta_W = \pi/10$ e $V_0 = -10$ meV. p. 143
- 69 Comportamento médio da influência do campo magnético sobre o espectro de energia para superredes formadas com poços de potenciais para três, quatro e cinco poços com profundidades aleatórias, com $\theta_W = \pi/10$ e $V_0 = -10$ meV, obtido pela média de dez realizações distintas incluindo o desvio padrão, para (a) os $2N$ estados com as duas primeiras sub-bandas e para apenas (b) os N primeiros estados. p. 144
- 70 Representação esquemática dos vetores posição do elétron \vec{r}_e e do buraco \vec{r}_h no plano do anel. p. 146
- 71 Esboço da matriz pentadiagonal em blocos proveniente do esquema de diferenças finitas no modelo de massa efetiva em duas dimensões. A matriz é toda nula, exceto nas diagonais representadas pelas linhas sólidas e tracejadas, isto é, para as diagonais principais e suas diagonais adjacentes dos blocos de matrizes que formam as diagonal principal da matriz total, para os elementos $((j-1)N_e+1, jN_e)$ e $(jN_e, (j-1)N_e+1)$ dos blocos da diagonal principal, para as diagonais principais dos blocos de matrizes adjacentes aos blocos de matrizes que formam a diagonal principal da matriz total e para a diagonal principal nas duas matrizes inferior esquerda e superior direita. Cada bloco consiste de uma matriz quadrada $(N_e \times N_e)$, sendo N_e o número de pontos discretizados na coordenada θ_e . Existem $(N_h \times N_h)$ blocos na matriz de $H_{eff(exc)}$, onde N_h é o número de pontos discretizados na coordenada θ_h . Dessa forma, o número total de elementos na matriz $H_{eff(exc)}$ é $N_e \times N_e \times N_h \times N_h$ p. 157

- 72 Função de onda proveniente do esquema de diferenças finitas no modelo de massa efetiva em duas dimensões. Ψ é representada por uma matriz coluna composta por N_h matrizes ($1 \times N_e$). p. 158
- 73 Imagens de AFM 2D e 3D mostrando ambos pontos e anéis quânticos. Temperatura de crescimento igual a 680°C . Os diâmetros externos dos anéis e pontos são de $550 - 580$ e $230 - 340$ nm com alturas $7 - 16$ e $3 - 10$ nm, respectivamente [78]. p. 158
- 74 Perfil esquemático das superfícies interna e externa de um anel bidimensional com rugosidade [31]. p. 159
- 75 Espectro de energia como função do campo magnético para um elétron no anel quântico com rugosidade formada pelo potencial de superrede Eq. (5.55) com cem, duzentas e quinhentas camadas, tomando-se a largura angular constante e de valor igual à $\theta_W = 2\pi/N_{CAM}$, para as profundidades de (a) -10 meV, (b) -20 meV e (c) -30 meV. p. 164
- 76 Perfis do potencial rugoso com cem, duzentas e quinhentas camadas, formados tomando-se as larguras angulares de cada camada como sendo constante e de valor igual à $\theta_W = 2\pi/N_{CAM}$ p. 165
- 77 Espectro de energia do exciton no anel quântico na ausência de potencial coulombiano de interação elétron-buraco. p. 165
- 78 Espectro de energia em função do campo magnético na presença de potencial coulombiano atrativo, dado pela Eq. (5.42), tomando $a = 50\text{Å}$ sem a presença de nenhum agente externo. p. 166
- 79 Potencial de interação excitônico em meV na presença de uma impureza localizada no ângulo π (a) sem e (b) com a presença de rugosidade, com potencial rugoso V_{rugoso} dado pela Eq. (5.55) para a coordenada do elétron (θ_e) e do buraco (θ_h), formado por um potencial aleatório com cento e cinquenta camadas e com valor máximo V_0 de -5 meV. p. 166
- 80 Energia do estado fundamental em meV, eixo z , como função do campo magnético e da altura da impureza, localizada no ângulo π p. 167

-
- 81 Comportamento dos três primeiros estados do exciton como função do campo magnético para quatro valores de campo elétrico distintos (a) na ausência e (b) na presença de uma impureza negativa localizada em $\theta = \pi$ e $z_{imp} = 45\text{Å}$ p. 168
- 82 Espectro de energia do exciton como função do campo magnético com uma impureza localizada em $\theta = \pi$ e $z_{imp} = 45\text{Å}$ variando (a) o número de camadas do potencial e (b) a amplitude da rugosidade, e na ausência de rugosidade, mostrado com os símbolos pretos. p. 169

Lista de Tabelas

1	Coordenadas dos pontos especiais da primeira zona de Brillouin.	p. 38
2	Parte da tabela periódica que contem alguns elementos capazes de formar compostos semicondutores.	p. 47
3	Sistemas de dimensionalidade reduzida e seus respectivos números de graus de liberdade D_l e de direções de confinamento D_c	p. 55
4	Energia e natureza, direta (d) ou indireta (i), do <i>gap</i> de semicondutores importantes (à temperatura ambiente) [7].	p. 66
5	Energias de ligação de excitons E_b [13].	p. 67

Capítulo 1

Introdução

Neste capítulo faremos uma breve introdução, abordando de maneira básica conceitos teóricos fundamentais que serão de extrema importância para o entendimento dos capítulos subsequentes. Inicialmente daremos uma visão do contexto histórico com ênfase na importância da nanotecnologia e suas aplicações. Em seguida, discutiremos conceitos físicos que compõem a análise das propriedades de anéis quânticos, como a teoria das bandas de energia, a teoria da massa efetiva, as consequências da redução da dimensionalidade e a presença de excitons e impurezas em nanoestruturas.

1.1 Um pouco de história: dispositivos semicondutores

O mundo no século XX experimentou grandes transformações econômicas e sociais devido principalmente ao advento da eletrônica e das tecnologias relacionadas a ela. O início do século XX, notadamente durante os anos 1920, foi fundamental para tais transformações e desenvolvimento, pois houve um enorme progresso na física teórica com o aparecimento da mecânica quântica, fundamentada por Bohr, de Broglie, Heisenberg, Schrödinger e outros. Os subsequentes investimentos em pesquisa básica e aplicada garantiram os presentes avanços nas áreas científica e tecnológica, o que culminou na criação do ramo da tecnologia mais marcante do século XX: a eletrônica.

O início da história do desenvolvimento dos dispositivos eletrônicos iniciou-se em 1874, quando Karl Ferdinand Braun (1850 - 1918) construiu um retificador com um cristal de Galena, ou como é comumente conhecido, sulfeto de chumbo (PbS), soldado com um fio metálico, um diodo de ponta de contato, observando que o fluxo de corrente total era alterado, passando a depender da polarização da tensão aplicada e das condições da

superfície do material, tal que a circulação da corrente através do cristal é menor em um dos sentidos. Desta forma descobriu-se um caráter assimétrico da condução elétrica entre metais e semicondutores [1].

Lee De Forest, nos Estados Unidos, inventou em 1906 a válvula triodo, um dispositivo que tornou possível a amplificação de sinais elétricos através de três eletrodos contidos em um tubo à vácuo: o catodo, que emite elétrons quando aquecido; o anodo, que recebe os elétrons; e a grade, situada entre o catodo e o anodo, que serve para controlar o fluxo de elétrons e possibilitar a amplificação dos sinais. Existe também o diodo, que possui apenas dois eletrodos, assim como o pentodo, que possui cinco. O funcionamento de qualquer válvula é baseado no controle do movimento dos elétrons entre os eletrodos por meio de um campo elétrico atuante sobre sua carga. A amplificação dos sinais, dentre outros aspectos importantes, possibilitou o surgimento do primeiro e muito importante produto da eletrônica: o rádio. Nos Estados Unidos, foram anos de pesquisas, tentativas e aprimoramentos até Lee De Forest instalar a primeira “estação-estúdio” de radiodifusão, em Nova Iorque, no ano de 1916, acontecendo então o primeiro programa de rádio de que se tem notícia [2, 3]. Lee De Forest também foi o primeiro a transmitir música de ópera pelo rádio e o primeiro a transmitir programas humorísticos. Mas foi a Westinghouse Electric Co. que teve a honra de promover a primeira difusora comercial do mundo, a bem conhecida "K. D. K. A." de Pittsburgh. Ela começou a funcionar regularmente em 1920 e a partir desse ponto na história, dia após dia, vem aumentando cada vez mais o número de estações de rádio pelo mundo [4].

Entretanto, a eletrônica baseada em válvulas a vácuo possuía certas limitações, como o elevado aquecimento, a vida curta, fabricação dispendiosa, eram grandes e frágeis, além de várias outras desvantagens técnicas. Estas desvantagens incentivaram o início de pesquisas para o desenvolvimento de dispositivos baseados em cristais. Foi dessa forma que, a partir de 1940, o químico Russel Shoemaker Ohl (1898 - 1987), trabalhando na obtenção de silício altamente purificado, conseguiu produzir bastões de silício com dopagem tipo p e n nas extremidades opostas, que constitui o primeiro diodo de junção p-n.

Apesar desses diodos primitivos terem uma grande importância para posterior descoberta na eletrônica, ainda existiam na época alguns problemas que só foram contornados em 23 de dezembro de 1947 nos Laboratórios da Bell Telephone (Murray Hill, NJ, USA), quando os físicos John Bardeen, Walter Brattaun e William Shockley, enquanto estudavam propriedades de condução eletrônica em semicondutores de silício e germânio para utilização como detetores de radar, descobriram e colocaram em funcionamento o primeiro

transistor, um transistor bipolar com o mostrado na Figura 1, um dispositivo de três elementos que possibilitava o controle da corrente elétrica no interior do semicondutor, que substituiria a válvula triodo. Tal descoberta deu a eles o prêmio Nobel de Física em 1956.

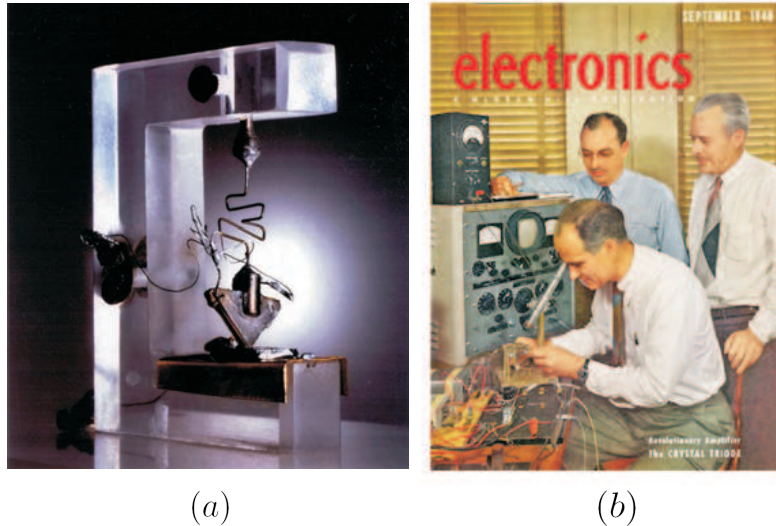


Figura 1: (a) Fotografia do primeiro transistor bipolar, conhecido como transistor de ponto de contato, criado em dezembro de 1947 na Bell Labs. (b) Fotografia dos inventores do transistor: John Bardeen (à esquerda), William Shockley (ao centro) e Walter Brattain (à direita) divulgada na capa da revista Electronics em setembro de 1948 com título Crystal Triode [5].

As seguintes décadas marcaram a eletrônica com advento dos circuitos integrados (CI), compostos por vários transistores reunidos em um único cristal de silício, formando um circuito eletrônico completo, e com sua miniaturização, em que os CI's passavam a possuir elementos cada vez menores ($\approx 10^{-6}\text{m}$), o que deu origem à microeletrônica. O circuito integrado foi desenvolvido de forma independente na empresa Texas Instruments, por Jack Kilby, em 1958, e na empresa Fairchild Semiconductors, por Jean Hoerni e Robert Noyce em 1959 (ver Figura 2). Na década de 1960, continuou-se de maneira contínua a diminuição das dimensões dos circuitos, tornando possível a criação dos microprocessadores, com os quais foi possível fabricar os microcomputadores que, com sua consequente evolução, modificaram o comportamento social e cultural, tornando a eletrônica uma das principais causas do desenvolvimento científico e tecnológico do século XX.

Além dos mencionados acima, outros dispositivos foram desenvolvidos ao longo desses anos, com aplicações baseadas em propriedades ópticas, magnéticas, térmicas, etc, de materiais sólidos. A descoberta desses dispositivos só foi possível graças ao conhecimento acumulado com as atividades de pesquisa em Física do Estado Sólido, área da Física que estuda propriedades e fenômenos que ocorrem em materiais sólidos. Com o progresso das técnicas experimentais e teóricas de investigação, esta área se estendeu a materiais mais

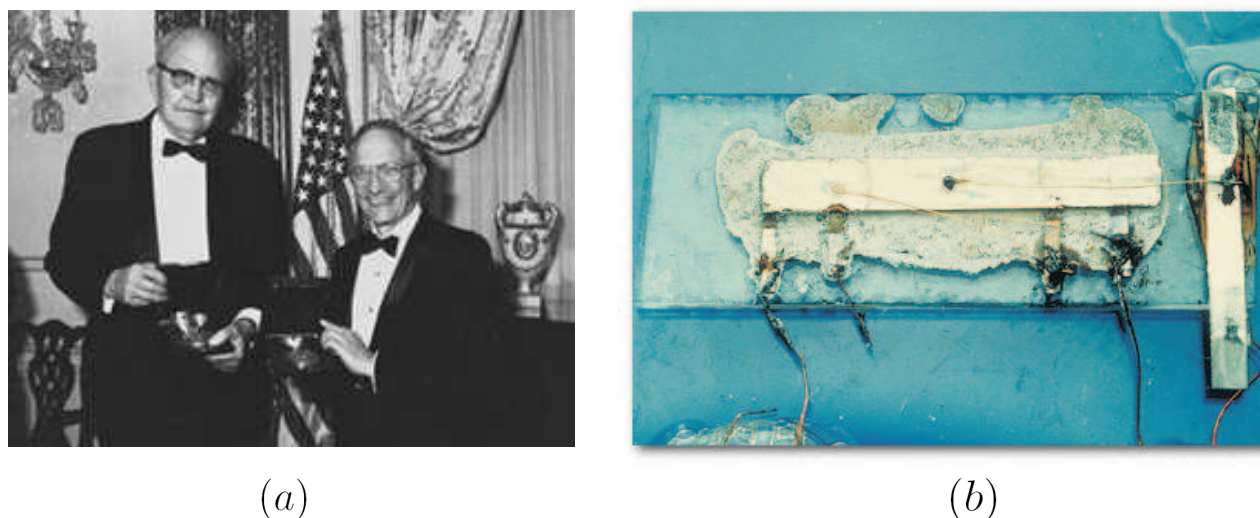


Figura 2: (a) Fotografia de Jack S. Kilby, da empresa Texas Instruments (à esquerda), e Robert Noyce, da empresa Fairchild Semiconductor (à direita) [6]. (b) Fotografia do primeiro circuito integrado da história desenvolvido por Jack S. Kilby em 1958 [5].

complexos, como vidros, polímeros orgânicos, ligas amorfas e inclusive líquidos, de modo que esse ramo da Física passou a ser conhecido como Física da Matéria Condensada.

A área de Física da Matéria Condensada fez inúmeras descobertas, graças às vastas linhas de pesquisa que surgiram e às grandes aplicações em vários segmentos da ciência, concentrando mais de 40% dos físicos em todo o mundo [7]. A importância dessa área não se deve apenas à sua aplicabilidade tecnológica, mas também, à enorme variedade de fenômenos que deram origem a descobertas fundamentais e excitantes, razão pela qual cerca de 50% dos ganhadores do prêmio Nobel nos últimos 30 anos tenham sido dados a físicos que trabalham neste campo do conhecimento, como por exemplo: J. Bardeen, L. N. Cooper e J. R. Schrieffer (1972 - teoria de supercondutividade), L. Esaki, I. Giaever e B. Josephson (1973 - efeito de tunelamento em sólidos), P. Kaptisa (1978 - estudo em baixas temperaturas), N. Bloembergen, A. L. Schawlow e K. M. Siegbahn (1981 - espectroscopia com lasers e de fotoelétrons), K. von Klitzing (1985 - efeito Hall quântico), G. Binning, H. Rohrer e E. Ruska (1986 - invenção do microscópio de tunelamento e do microscópio eletrônico), B. N. Brockhouse e C. G. Shull (1994 - desenvolvimento de técnicas de espalhamento de nêutrons para o estudo de materiais), R. B. Laughlin, H. L. Stormer e D. C. Tsui (1998 - descoberta de fluido quântico com excitações de carga fracionária), Z. I. Alferov e H. Kroemer (2000 - desenvolvimento de heteroestruturas de semicondutores) entre outros. As descobertas nesse ramo possibilitaram, por exemplo, o desenvolvimento

dos transistores (FET¹, MOSFET² e CMOS³), diodos, LED's (diodos de emissão de Luz), dos circuitos integrados e inúmeros outros dispositivos que revolucionaram a eletrônica, sendo utilizados em computadores, celulares, câmeras digitais, aparelhos de DVD, CD players e outros extensivamente usados em muitas áreas da atividade humana [8].

Neste contexto, o estudo das estruturas de baixa dimensionalidade, como poços, fios, pontos e anéis quânticos, cuja produção tem se tornado possível graças ao desenvolvimento das técnicas de crescimento de materiais, tem atraído bastante atenção da comunidade científica, já que grande parte dos dispositivos opto-eletrônicos atuais são compostos por essas estruturas formadas por diferentes semicondutores. Faremos aqui um estudo de uma dessas estruturas, o anel quântico. O conhecimento das propriedades eletrônicas dessas estruturas é importante no ponto de vista da ciência, pois apresentam características peculiares que não são observadas em sistemas macroscópicos.

1.2 Estrutura de bandas

1.2.1 Análise qualitativa

Vamos primeiramente compreender o efeito da presença de um grande número de átomos próximos, como em um sólido, sobre os estados eletrônicos, fazendo em primeira instância uma simples explicação qualitativa. Esta análise consiste em trazer um átomo isolado para próximo de outro, repetindo esse feito até termos um grande número de átomos para formar uma estrutura extensa⁴, analisando os níveis de energia e vendo como estes são perturbados. Consideremos primeiramente o problema do átomo de um elétron, isto é, o problema de átomos isolados, bastante conhecido na literatura. Átomos isolados possuem níveis de energia discretos (quantizados) para os estados eletrônicos, caracterizados por orbitais atômicos designados por 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d etc. Já para o caso de um átomo de muitos elétrons, o estado fundamental é formado distribuindo-se os pares de elétrons de spins opostos nos níveis de menor energia possível, obedecendo ao Princípio de Exclusão de Pauli. Os elétrons que ocupam as camadas mais externas são chamados elétrons de valência, sendo estes de grande importância, pois participam das ligações entre átomos, além de serem fundamentais na determinação de muitas propriedades físicas e químicas dos sólidos.

¹Do inglês *Field Effect Transistor*.

²Do inglês *Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor*.

³Do inglês *Complementary MOSFET*.

⁴Do inglês *bulk*.

No caso de dois átomos, quando estão inicialmente bem afastados, todos os níveis de energia desse sistema têm uma dupla degenerescência de troca, isto é, para o sistema total, a parte espacial da autofunção dos elétrons pode conter uma combinação das autofunções espaciais individuais dos átomos que seja simétrica na troca de pares de coordenadas eletrônicas ou que seja anti-simétrica em uma troca desse tipo, obedecendo o fato de que a autofunção total do sistema de elétrons seja anti-simétrica. Porém, quando os átomos são aproximados, a degenerescência de troca é removida, tal que um dado nível de energia do sistema é desdobrado em dois níveis distintos, devido à superposição das autofunções dos átomos individuais. A separação entre esses níveis se dá à medida que diminui a distância entre os átomos. Se agora tomarmos três átomos isolados, teremos uma tripla degenerescência de troca dos níveis de energia, e ao colocarmos os átomos juntos em uma rede linear uniforme, cada um dos níveis se desdobrará em três níveis distintos. De maneira análoga, quando considerarmos um sistema formado por N átomos de um mesmo tipo, cada nível de um desses átomos dará origem a um nível do sistema N vezes degenerado, quando os átomos estiverem separados. Quando a separação diminuir, cada um desses níveis se desdobrará em um conjunto de N níveis. Podemos verificar esse comportamento do desdobramento dos níveis quando aproximamos os átomos na Figura 3.

Assim, no caso do sólido, que apresenta grande número de átomos próximos uns dos outros (cerca de $10^{22}/\text{cm}^3$, ou equivalentemente 10^{23} átomos/mol), tal que os elétrons de cada átomo estão sujeitos às interações com os átomos vizinhos, veremos que os níveis de cada conjunto em um sólido estão de tal forma próximos que podemos assumir que constituem praticamente uma banda contínua de energia, como pode ser visto na Figura 3.

Vemos na Figura 3 que, ao aproximarmos dois átomos, seus níveis são levemente perturbados, mas quando repetimos isto várias vezes até obtermos um grande número de átomos, teremos um grande número de níveis próximos um dos outros, formando faixas quase contínuas de energia permitidas, isto é, as bandas de energia, que são separadas por faixas de energias proibidas, chamadas de *gaps*, como ilustrado na Figura 4. Também podemos observar que os níveis de energia mais baixos são menos atingidos pelo desdobramento. A razão disso é que os elétrons dos níveis mais baixos são elétrons das camadas mais internas dos átomos, que por sua vez são pouco influenciados pela presença dos átomos vizinhos. Por outro lado, os elétrons de valência são totalmente delocalizados para valores pequenos da separação entre os centros dos átomos \mathbf{a} .

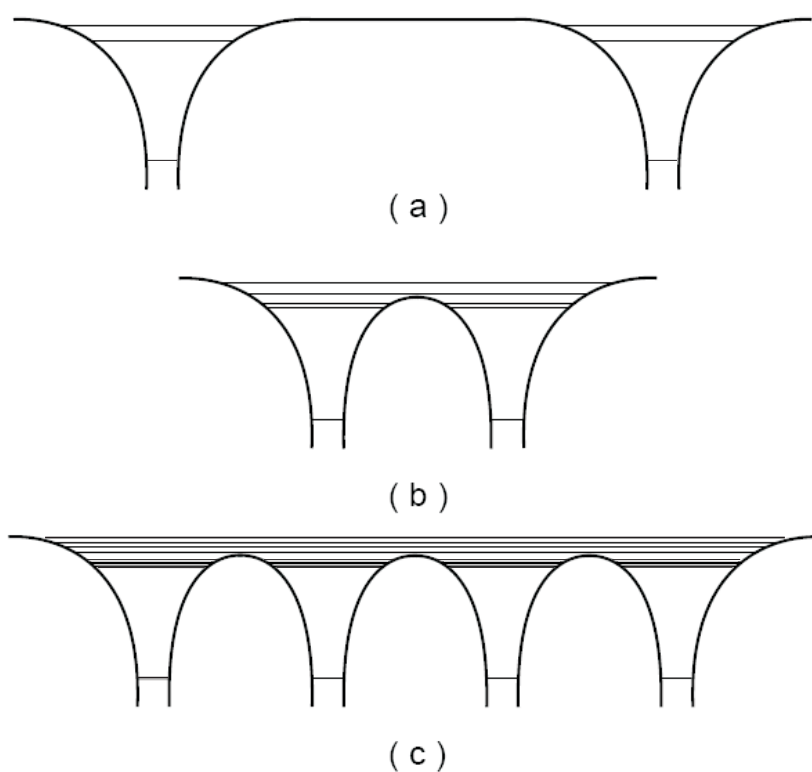


Figura 3: (a) Esquema de níveis de energia para dois átomos isolados. (b) Esquema de níveis de energia para os mesmos dois átomos em uma molécula diatômica. (c) Esquema de níveis de energia para quatro átomos do mesmo tipo em um cristal rudimentar unidimensional. Observe que o nível mais baixo não é desdobrado apreciavelmente porque as autofunções atômicas para esse nível não se superpõem de forma significativa [9].

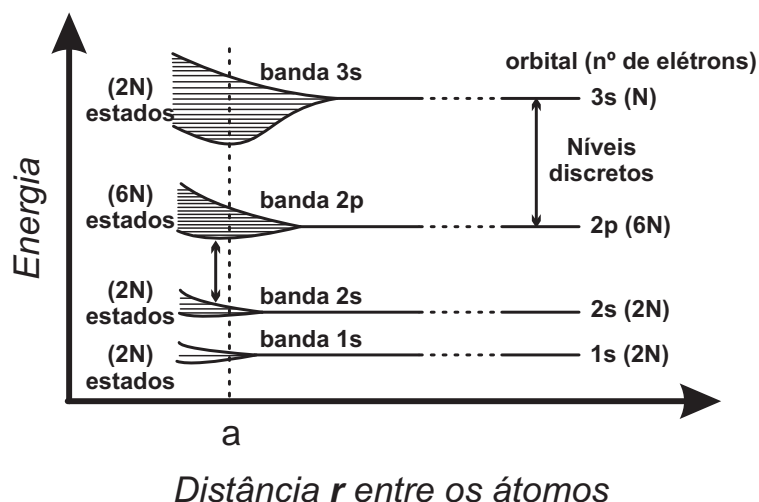


Figura 4: Formação de bandas de energia devido à aproximação para N átomos de sódio, cuja configuração eletrônica é $(1s^2)(2s^2)(2p^6)(3s)$, mostrando explicitamente o *gap* entre elas [7].

Algumas observações importantes podem ser feitas a respeito da Figura 4, como por exemplo: o desdobramento dos níveis de energia começa quando a separação entre os centros dos átomos a torna-se pequena, de tal maneira que as autofunções dos átomos começam a se superpor; para uma distância infinita, os níveis de energia de estados equivalentes coincidem e são iguais aos de um átomo isolado; os níveis desdobrados são espalhados em torno dos estados de um átomo isolado; a diferença de energia entre os níveis mais baixo e mais alto de um conjunto particular depende da separação a , pois essa separação especifica a intensidade da superposição que provoca o desdobramento, e não depende significativamente do número de átomos do sistema, se for mantida a mesma distância a , tal que, se aumentarmos o número de átomos ao sistema, aumentará apenas o número de subníveis contido no mesmo conjunto desdobrado, cobrindo o mesmo intervalo de energia; o número de subníveis em um mesmo conjunto desdobrado é igual a $2(2l+1)N$, sendo l o número quântico orbital.

1.2.2 O teorema de Bloch

O cálculo dos estados eletrônicos e das energias em um sólido não é tão trivial quanto o de um átomo isolado, por ser em princípio um problema de muitos elétrons, que deveria ser solucionado utilizando teorias de muitos corpos [10], já que o Hamiltoniano completo do sólido contém não apenas os potenciais devido às interações dos elétrons com os núcleos atômicos, mas também potenciais de par das interações elétron-elétron. Devido a tal complexidade, assumiremos algumas aproximações ao problema. A primeira consideração consiste em supor que os núcleos dos átomos que compõem o cristal são fixos e com

posições conhecidas na rede cristalina. Essa consideração é chamada de **aproximação adiabática**. Outra aproximação consiste em considerar que o problema envolve apenas um só elétron (modelo de um elétron), e que todos os outros elétrons são considerados parte integrante dos íons que criam um potencial periódico, como ilustrado na Figura 5. Uma terceira consideração consiste em uma idealização de um cristal ideal fictício, exigindo que a rede cristalina seja perfeitamente pura sem apresentar impurezas nem deformações, e que qualquer efeito das imperfeições seja tratado como perturbação. Tais considerações levam a um potencial $V(\mathbf{r})$ com a periodicidade da rede cristalina, ou seja,

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

para todos os vetores \mathbf{R} da rede de Bravais⁵.

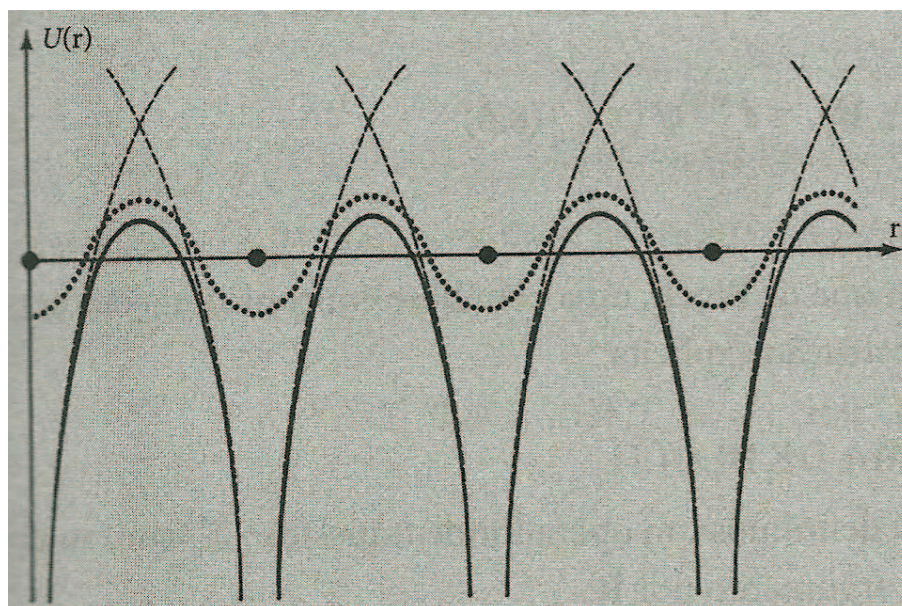


Figura 5: Potencial periódico cristalino representado graficamente ao longo de uma linha de íons e ao longo de uma linha no meio de um plano de íons. Os círculos fechados são os sítios de íons de equilíbrio; as curvas sólidas fornecem o potencial ao longo da linha de íons; as curvas pontilhadas, o potencial ao longo de uma linha entre planos de íons; e as curvas tracejadas, o potencial de íons individuais isolados [11].

Considerando o potencial periódico, como mostrado na Figura 5, e as aproximações que reduziram o problema a um modelo de um elétron, somos levados a resolver a equação de Schrödinger para um único elétron

$$H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.2)$$

⁵Uma rede de Bravais é um conjunto infinito de pontos discretos com arranjo e orientação que parecem exatamente os mesmos, de qualquer um dos pontos de onde o arranjo seja visualizado. Uma rede de Bravais tridimensional é constituída por todos os pontos com vetores de posição \mathbf{R} que podem ser escritos na forma $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, onde os \mathbf{a}_i , com $i = 1, 2$ e 3 , são chamados de vetores primitivos [11].

obedecendo a relação de periodicidade da rede dada pela Eq. (1.1).

Os elétrons independentes que obedecem individualmente à equação de Schrödinger com potencial periódico são chamados de elétrons de Bloch, sendo os autoestados da equação de Schrödinger conhecidos como estados de Bloch. Estes estados possuem uma propriedade muito importante dada pelo **Teorema de Bloch**, que diz que os autoestados ψ do Hamiltoniano de um elétron na Eq. (1.2), para um potencial periódico como o da Eq. (1.1), podem ser escritos na forma de uma onda plana multiplicada por uma função com a periodicidade da rede:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.3)$$

onde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é tal que

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.4)$$

Podemos observar que as Eqs. (1.3) e (1.4) implicam que

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.5)$$

Expressando o Teorema de Bloch em uma forma alternativa, podemos substituir as Eqs. (1.3) e (1.4), pela Eq. (1.5), em que os autoestados do Hamiltoniano podem ser escolhidos de modo que, associado a cada ψ , esteja um vetor de onda \mathbf{k} de tal forma que

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}). \quad (1.6)$$

Este é precisamente o Teorema de Bloch. A prova desse teorema pode ser encontrada na página 144 da referência [11].

1.2.3 Condições de contorno de Born-Von Karman

Impondo condições de contorno apropriadas sobre os estados de Bloch, podemos demonstrar que o vetor \mathbf{k} deve ser real e assumir apenas valores restritos. Como estamos considerando que a estrutura é grande em relação ao parâmetro de rede, isto é, que as dimensões do material *bulk* são bem maiores que o parâmetro de rede do cristal, suas propriedades não devem depender das condições de contorno escolhidas, o que nos permite escolhê-las da maneira mais conveniente possível.

Optamos por as conhecidas condições de contorno de Born-Von Karman, que exigem que os autoestados satisfaçam as condições de contorno periódicas nas bordas do cristal,

ou seja,

$$\psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \psi(\mathbf{r}), \text{ para } i = 1, 2 \text{ e } 3, \quad (1.7)$$

onde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 são os vetores que geram uma célula primitiva do cristal e as dimensões $N_1|\mathbf{a}_1|$, $N_2|\mathbf{a}_2|$ e $N_3|\mathbf{a}_3|$, onde N_1 , N_2 e N_3 são inteiros positivos, representam o número de células N_i que o cristal possui na direção \mathbf{a}_i , como ilustrado na Figura 6 para um cristal paralelepípedo [11].

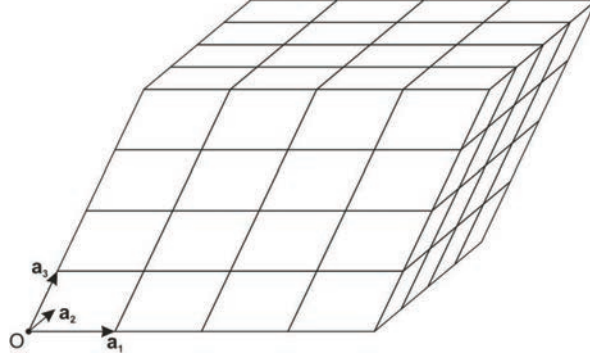


Figura 6: Cristal finito em forma de paralelepípedo com 4 células na direção de cada vetor que compõe a célula unitária.

Com a condição de contorno de Born-Von Karman, vemos que o problema torna-se o de um cristal infinito, em que podemos utilizar o teorema de Bloch para solucioná-lo. Aplicando as condições de contorno (1.7) aos estados de Bloch e utilizando a Eq. (1.5) temos que:

$$\psi_{nk}(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} \psi_{nk}(\mathbf{r}) = \psi_{nk}(\mathbf{r}), \text{ para } i = 1, 2 \text{ e } 3, \quad (1.8)$$

que requer que

$$e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} = 1, \text{ para } i = 1, 2 \text{ e } 3. \quad (1.9)$$

Escrevendo o vetor \mathbf{k} como $\mathbf{k} = k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 + k_3 \mathbf{b}_3$, onde os vetores \mathbf{b}_i constituem a célula unitária do espaço recíproco que satisfazem as relações $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$, para todo $i = 1, 2$ e 3 , obtemos que

$$e^{2\pi i N_i k_i} = 1, \text{ para } i = 1, 2 \text{ e } 3. \quad (1.10)$$

Consequentemente,

$$k_i = \frac{m_i}{N_i}, \text{ onde } m_i \text{ é um inteiro.} \quad (1.11)$$

Portanto, a forma geral para os vetores de onda \mathbf{k} permitidos nos estados de Bloch é

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \mathbf{b}_i \quad (1.12)$$

tal que o número de vetores de onda permitidos \mathbf{k} em uma célula unitária do espaço recíproco, como $m_i = 0, 1, 2, \dots, N_i - 1$, é igual ao número total de células do cristal, isto é, igual a $N = N_1 N_2 N_3$. Da Eq. (1.12) vemos que os vetores \mathbf{k} são reais e discretos. O vetor \mathbf{k} é chamado de *momento cristalino* e interpretado como um número quântico característico associado à simetria translacional discreta de um potencial periódico [11].

1.2.4 Formação das bandas de energia: os números n do teorema de Bloch

Até agora não fizemos nenhum comentário a respeito do índice n que aparece no teorema de Bloch, apenas do número quântico \mathbf{k} , como dissemos anteriormente, associado à simetria de translação discreta do Hamiltoniano. O índice n está relacionado aos vários estados possíveis para um dado \mathbf{k} , soluções da equação de Schrödinger. Analisemos isso mais claramente, procurando por todas as soluções da equação de Schrödinger (1.2) que têm a forma de Bloch $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u(\mathbf{r})$, onde \mathbf{k} é fixo e u tem a periodicidade da rede de Bravais, como na Eq. (1.4). Substituindo esta solução na equação de autovalor do Hamiltoniano,

$$H e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.13)$$

e manuseando analiticamente a equação, obtemos que:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= E e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{i}\nabla + \mathbf{k}\right)^2 + V(\mathbf{r})\right)u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}E u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ \left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{i}\nabla + \mathbf{k}\right)^2 + V(\mathbf{r})\right)u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= E u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ H_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= E u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.14)$$

com condição de contorno

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (1.15)$$

A Eq. (1.14) pode ser considerada, para um dado \mathbf{k} , como uma nova equação de autovalor, restrita a uma única célula primitiva do cristal, com uma família de infinitas soluções com autovalores discretamente espaçados, rotulados pelo índice n da banda de energia, sendo $E_n(\mathbf{k})$ o n -ésimo autovalor dessa equação e $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ o autovetor correspondente. Vimos pela Eq. (1.12), com a utilização das condições de contorno de Born-Von Karman, que apenas certos valores de \mathbf{k} são possíveis. Porém é frequentemente útil buscar por outros valores de \mathbf{k} , varrendo todo o espaço k , e não somente restrito a uma única célula primitiva. Dessa forma, para dois valores de \mathbf{k} que diferem apenas por um vetor da

rede recíproca⁶, temos que o conjunto de todas as funções de onda e de níveis de energia deve ser igual. Atribuimos assim os índices n aos níveis de energia, tal que, para um dado n , os autoestados e autovalores são funções periódicas de \mathbf{k} da rede recíproca:

$$\begin{aligned}\psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r}) &= \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ E_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) &= E_n(\mathbf{k}).\end{aligned}\quad (1.16)$$

As funções acima dão origem à *estrutura de bandas* do sólido, em que, para um dado n , o conjunto dos níveis de energia é determinado pela função $E_n(\mathbf{k})$, que é chamada da n -ésima *banda de energia*. Na Figura 7, mostramos a estrutura de bandas unidimensional para o problema de um elétron submetido a um potencial periódico, ilustrando as curvas de energia permitidas (linha sólida) em função do vetor \mathbf{k} para as seis primeiras zonas de Brillouin, onde cada zona de Brillouin é uma célula primitiva da rede recíproca; as energias para um elétron livre (a linha tracejada); e as faixas de energias permitidas (regiões cinza) separadas pelos *gaps*⁷(regiões branca) do lado direito da figura.

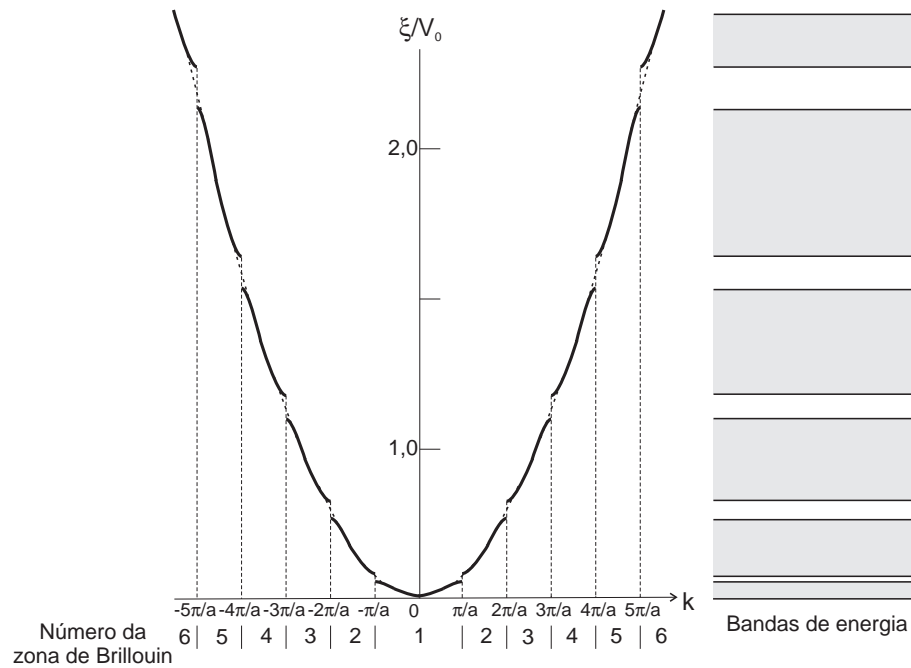


Figura 7: Energias permitidas em função do vetor k , para uma rede unidimensional de periodicidade a . A linha tracejada é a energia para o caso de um elétron livre. As bandas de energia permitidas e proibidas resultantes aparecem à direita [9].

⁶Dado por $\mathbf{K} = \sum_i n_i \mathbf{b}_i$, onde n_i é um inteiro para todo i .

⁷Bandas proibidas.

1.2.5 Esquema de zona reduzida: primeira zona de Brillouin

Como vimos, a energia é função do vetor de onda \mathbf{k} , dependendo não apenas do seu módulo, mas também de sua direção no cristal. Por isso, as bandas de energia devem ser representadas para as várias direções de \mathbf{k} no cristal, o que é chamado de esquema de zona estendida. Mas como \mathbf{k} pode assumir qualquer direção, então costuma-se utilizar os pontos em que \mathbf{k} possui as direções de maior simetria, como mostrado na Figura 8 e na Tabela 1.

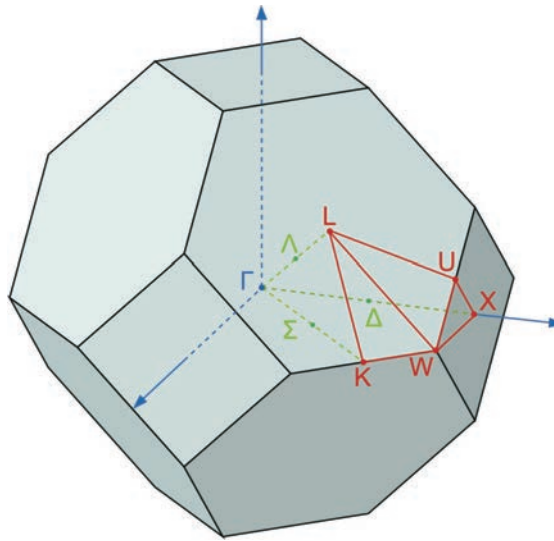


Figura 8: Primeira zona de Brillouin para uma estrutura cúbica de face centrada para cristais tipo Si, GaAs, AlAs, ZnSe e outros. Os pontos marcados são dados na Tabela 1.

Tabela 1: Coordenadas dos pontos especiais da primeira zona de Brillouin.

Γ	$(0, 0, 0)$
Λ	$\frac{\pi}{2a}(1, 1, 1)$
L	$\frac{\pi}{a}(1, 1, 1)$
Δ	$\frac{\pi}{a}(1, 0, 0)$
X	$\frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$
Σ	$\frac{3\pi}{4a}(0, 1, 1)$
K	$\frac{3\pi}{2a}(0, 1, 1)$

Na Figura 9, apresentamos a estrutura de bandas de um cristal de GaAs no esquema de zona estendida, representando-a com as direções de \mathbf{k} de maior simetria.

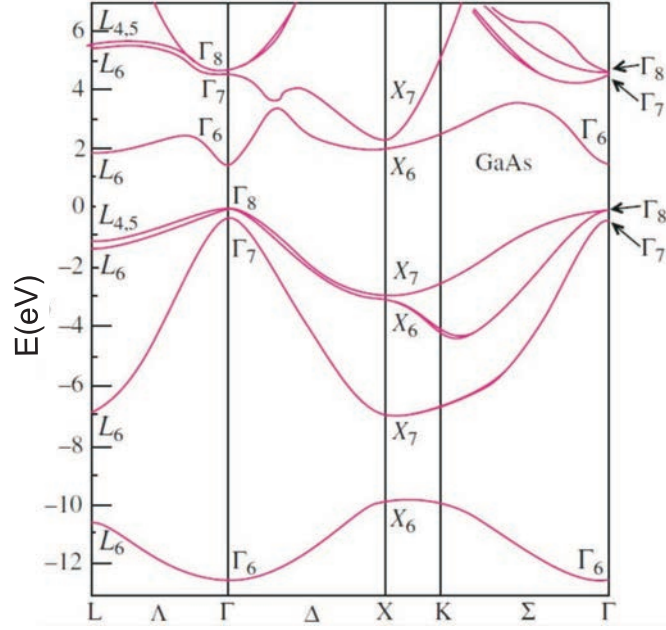


Figura 9: Estrutura de banda de GaAs [12].

O vetor de onda \mathbf{k} e todos os autoestados podem sempre ser representados mesmo se restringimos \mathbf{k} à primeira zona de Brillouin⁸ (ou a qualquer outra célula primitiva do espaço recíproco). Isso porque qualquer \mathbf{k}_0 que não esteja na primeira zona de Brillouin pode sempre ser escrito como

$$\mathbf{k}_0 = \mathbf{k} + \mathbf{K}, \quad (1.17)$$

onde \mathbf{k} pertence à primeira zona de Brillouin e \mathbf{K} é um vetor que pertence à rede recíproca. Como $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1$, então podemos escrever o estado de Bloch $\psi_{n\mathbf{k}_0}$ como

$$\psi_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (1.18)$$

Assim concluímos que

$$H_{\mathbf{k}_0} = H_{\mathbf{k}+\mathbf{K}} = H_{\mathbf{k}}. \quad (1.19)$$

Como as condições de contorno são as mesmas, os autovalores e os autoestados também serão os mesmos. Portanto, das Eqs. (1.16) e (1.17) temos que:

$$\begin{aligned} \psi_{n,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) &= \psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ E_n(\mathbf{k}_0) &= E_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = E_n(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (1.20)$$

mostrando que podemos limitar os valores de \mathbf{k} à primeira zona de Brillouin, sendo essa

⁸A primeira zona de Brillouin é a célula primitiva da rede recíproca, ou seja, o conjunto de pontos que ficam mais próximos a $\mathbf{K} = 0$ do que qualquer outro ponto da rede recíproca.

representação chamada de esquema de zona reduzida. Demonstramos essa representação na Figura 10(a), em que ilustramos todos os níveis com vetores de onda \mathbf{k} na primeira zona de Brillouin ao transladarmos todos os pedaços da Figura 7 por meio de vetores da rede recíproca, para dentro da primeira zona. Um exemplo disso é mostrado na Figura 11, para um elétron com vetor de onda na segunda zona de Brillouin, $-\pi/a < k < -2\pi/a$ e $\pi/a < k < 2\pi/a$, transladada para a primeira zona, $-\pi/a < k < \pi/a$, fazendo isso através de uma subtração no vetor de onda por um vetor com módulo $2\pi/a$, onde a é o parâmetro de rede.

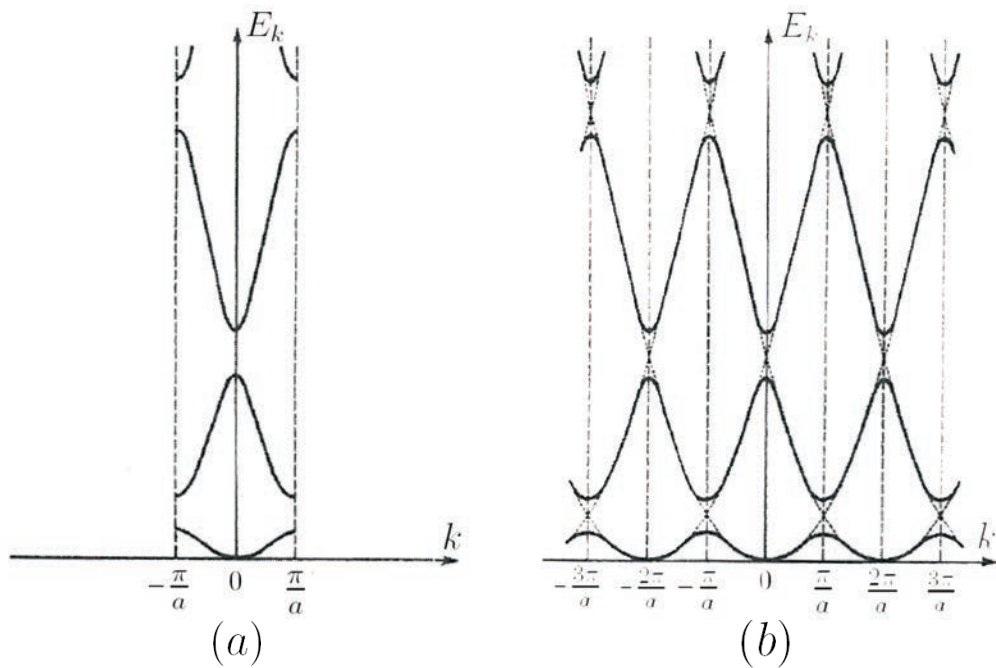


Figura 10: (a) Os níveis de energia mostrados em um esquema de zona reduzida. (b) Repetição por todo o espaço k da primeira zona de Brillouin formando o esquema de zona repetida [11].

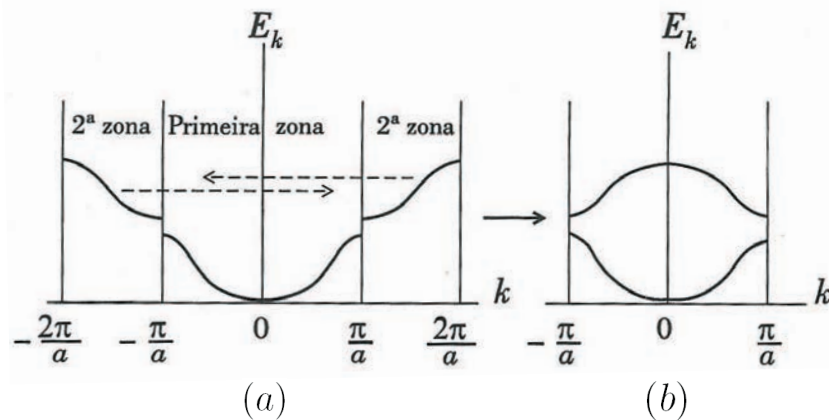


Figura 11: (a) Ilustração do deslocamento das bandas na segunda zona de Brillouin de $\pm 2\pi/a$. (b) Esquema de bandas reduzidas à primeira zona, resultante desse deslocamento [7].

Para enfatizar a periodicidade no espaço k , estende-se periodicamente o esquema da

zona reduzida da primeira zona de Brillouin, a Figura 10(a), por todo o espaço k , obtendo assim a representação no esquema de zona repetida, mostrada na Figura 10(b).

1.2.6 Modelo de Kronig-Penney

Na determinação das energias permitidas dos elétrons em um sólido abordada nas Seções anteriores, consideramos o efeito de se aproximar os átomos para a formação do cristal. Vimos que, ao considerarmos a rede cristalina como um problema de um elétron submetido a um potencial periódico, a função de Bloch, dada pela Eq. (1.6), é autoestado do Hamiltoniano desse sistema. Uma abordagem matematicamente mais simples, que apresenta todos os aspectos importantes para o problema, é conhecida como *modelo de Kronig-Penney* [9, 13, 14], em que se aproxima o potencial do cristal por uma sucessão de poços e barreiras de potencial retangulares de periodicidade idêntica à da rede, sendo cada poço uma representação aproximada do potencial produzido por um íon. Analisaremos agora este modelo.

Temos que, para poços profundos e bem espaçados, o elétron de energia não muito alta permanece praticamente ligado dentro de um dos poços, de modo que os autovalores de mais baixa energia são os de um único poço isolado. Já para o caso dos poços estarem mais próximos entre si, as autofunções podem tunelar nas barreiras de potencial, resultando em um alargamento do nível de energia único original em uma banda de níveis de energia. À medida que reduzimos a separação entre os poços, a banda torna-se mais larga, tal que no limite da largura das barreiras ser nula, obtemos um único poço muito largo em que todas as energias são permitidas, isto é, obtemos o modelo de um elétron livre. Podemos observar a formação das bandas de energia com a aproximação dos poços comparando-as com as energias de um poço simples na Figura 12.

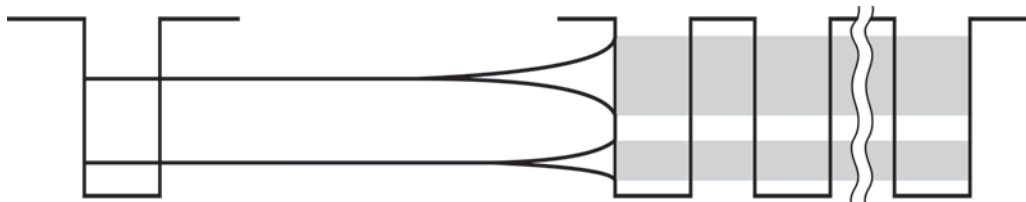


Figura 12: Representação esquemática de (a) dois estados de energia ligados para um elétron em um poço de potencial isolado, (b) duas bandas de energia para um elétron em um conjunto de poços e barreiras periodicamente espaçados [14].

Utilizando o modelo de Kronig-Penney verificaremos sob algumas aproximações a formação de uma banda de energia para a energia do estado fundamental para o sistema composto por poços e barreiras quadradas, mas esse resultado também é válido para

todos os outros níveis de energia [7]. Inicialmente consideremos o potencial periódico como sendo formado por diversos poços de potencial infinito unidimensionais igualmente espaçados. Sabemos que o estado fundamental desse sistema representa uma partícula completamente localizada em um dos poços. Assumiremos que a partícula está localizada no n -ésimo poço, denotando o estado por $|n\rangle$. $|n\rangle$ é um autoestado de energia com autovalor E_0 , tal que $H|n\rangle = E_0|n\rangle$. Como todos os poços de potenciais são idênticos e não interagem entre si, todos eles têm os mesmos valores de energia, portanto E_0 terá infinitos estados n degenerados.

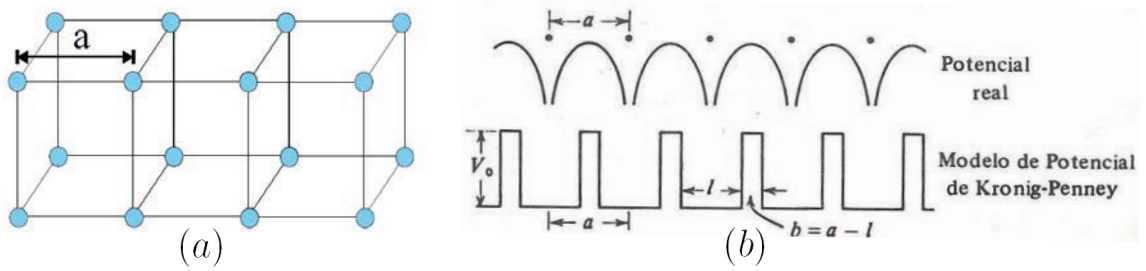


Figura 13: Representação esquemática de um (a) cristal de parâmetro de rede a e (b) seu potencial real e aproximado pelo modelo de Kronig-Penney [9].

Como o potencial da rede cristalina é periódico, considerando como periodicidade o parâmetro de rede a , mostrado na Figura 13, então o autoestado do sistema deve ser autoestado do operador translação $\tau(a)$ [15], definido como

$$\tau(a) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{p}a\right). \quad (1.21)$$

Como o operador de translação leva qualquer função espacial de um ponto da rede para outro somando o parâmetro a , $\tau(a)f(x) = f(x+a)$, então vemos que os estados $|n\rangle$ não são autoestados de τ , pois $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$, mas são, como já vimos, de H . Devemos então procurar autoestados simultâneos de $\tau(a)$ e H , uma vez que eles devem existir, pois $[\tau(a), H] = 0$. Escrevemos os novos estados como combinação linear dos estados $|n\rangle$:

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} |n\rangle, \quad (1.22)$$

onde θ é um parâmetro real com $-\pi \leq \theta \leq \pi$. Temos que esses novos estados são autoestados do Hamiltoniano, pois $|n\rangle$ é um autoestado de H com autovalor E_0 , independente de n , e como

$$\tau(a)|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} |n+1\rangle = e^{-i\theta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i(n+1)\theta} |n+1\rangle = e^{-i\theta} |\theta\rangle, \quad (1.23)$$

então $|\theta\rangle$ também é autoestado de $\tau(a)$.

Agora consideremos uma rede periódica formada com poços de potencial de barreira finita. A relação $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$ é válida, como no caso anterior, mas nesse caso os estados $|n\rangle$ não são autoestado de H , pois como as barreiras são finitas, as partículas têm uma probabilidade de tunelamento, representado esquematicamente na Figura 14.

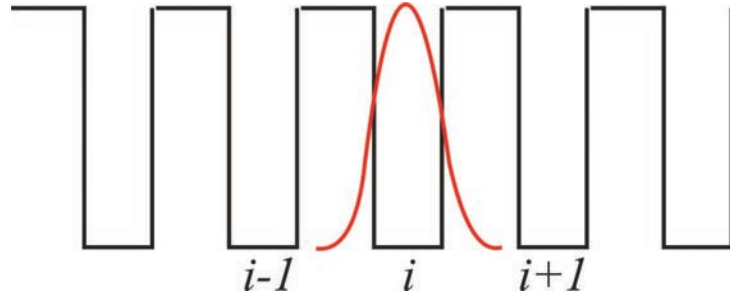


Figura 14: Representação esquemática de um potencial periódico formado por poços de barreira finita.

Os elementos da diagonal de H na base dos estados $|n\rangle$ são todos iguais, já que os poços são iguais, dados por

$$\langle n|H|n\rangle = E_0, \quad (1.24)$$

independente de n . Devido à probabilidade de tunelamento, temos que o Hamiltoniano não é mais diagonal na base $|n\rangle$, isto é, os termos fora da diagonal devem ser não-nulos. Negligenciando completamente os elementos de H referentes a poços distantes e considerando apenas as influências dos primeiros vizinhos, obtemos a aproximação conhecida como *tight-binding* [15], isto é:

$$\langle n'|H|n\rangle \neq 0, \text{ somente se } n' = n \text{ ou } n' = n \pm 1. \quad (1.25)$$

Tomemos por definição

$$\langle n \pm 1|H|n\rangle = -\Delta. \quad (1.26)$$

Utilizando as Eqs. (1.24) e (1.26), e a ortogonalidade entre $|n\rangle$ e $|n'\rangle$ quando $n \neq n'$, obtém-se

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle. \quad (1.27)$$

Como vemos, $|n\rangle$ não é autoestado de energia. Aplicando o operador H na função $|\theta\rangle$

dada pela Eq. (1.22), temos

$$\begin{aligned}
H|\theta\rangle &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} H|n\rangle \\
&= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} [E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle] \\
&= E_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} |n\rangle - \Delta \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} |n+1\rangle - \Delta \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} |n-1\rangle \\
&= E_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} |n\rangle - \Delta e^{-i\theta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i(n+1)\theta} |n+1\rangle - \Delta e^{i\theta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i(n-1)\theta} |n-1\rangle \\
&= E_0|\theta\rangle - \Delta(e^{-i\theta} + e^{i\theta})|\theta\rangle, \tag{1.28}
\end{aligned}$$

ou seja,

$$H|\theta\rangle = (E_0 - 2\Delta \cos \theta)|\theta\rangle. \tag{1.29}$$

Assim, encontramos os autovalores do Hamiltoniano, que dependem do parâmetro real contínuo θ , cuja interpretação física é dada quando associamos a função de onda no espaço das posições com uma onda plana caracterizada pelo vetor de propagação de onda k , modulada por uma função periódica, sendo portanto $\theta = ka$. Os autovalores formam uma banda de energia entre $E_0 - 2\Delta$ e $E_0 + 2\Delta$, respectivamente para $\theta = 0$ e $\theta = \pm\pi$, ver Figura 15(a). Dessa forma, temos

$$E(k) = E_0 - 2\Delta \cos(ka). \tag{1.30}$$

Como vemos, as autoenergias dependem de k . Na Figura 15(b), mostramos a forma da curva de dispersão definida pela Eq. (1.30) para primeira zona de Brillouin, isto é, k entre $-\pi/a$ a π/a .

Dessa forma, podemos observar mais uma vez que a presença de um potencial periódico gerado pela rede cristalina é responsável pela formação de bandas de energias contínuas e finitas.

1.3 Condutores, isolantes e semicondutores

Uma maneira comum de se classificar os materiais é quanto à sua condutividade, sua capacidade de transportar cargas elétricas. Essa característica está relacionada com os

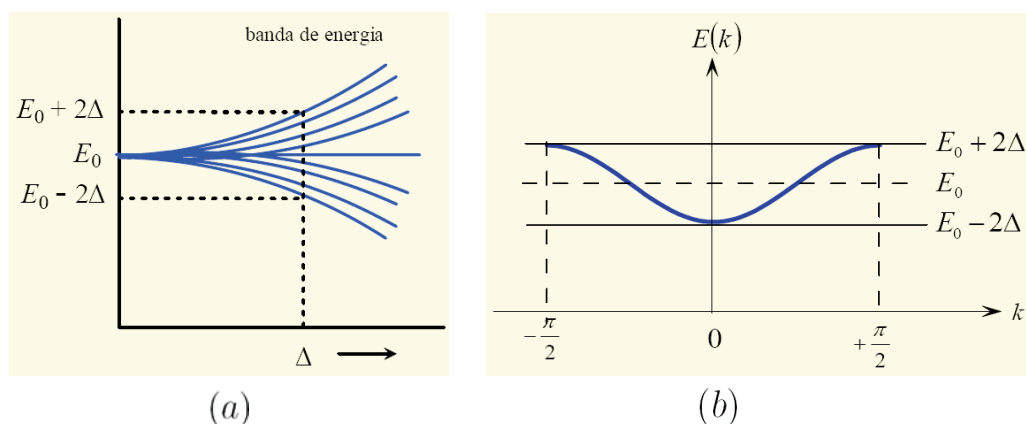


Figura 15: (a) Gráfico qualitativo mostrando o comportamento da quebra de degenerescência E como função do parâmetro Δ . (b) Curva de dispersão para a primeira zona de Brillouin.

últimos níveis de energia ocupados pelos portadores no estado fundamental, temperatura de $T = 0\text{K}$ (um caso hipotético para cristal), ou seja, está relacionada com as características do preenchimento da última banda de energia. Dessa forma, os sólidos podem ser classificados como isolantes, condutores e semicondutores.

A formação do estado fundamental do sólido é feita com o preenchimento dos níveis discretos de menor energia pelos elétrons, de maneira análoga ao que ocorre em um átomo. Do resultado desse preenchimento, duas possibilidades para o estado fundamental podem ocorrer: uma banda parcialmente preenchida ou não. Chamamos a última banda completamente preenchida de **banda de valência** e a primeira banda seguinte de **banda de condução**, que pode estar completamente vazia ou semi-preenchida. A diferença entre o mínimo da banda de condução e o máximo da banda de valência é denominada **gap**, como já mostrado na Figura 4, sendo uma faixa de energia proibida.

A 0K , tanto os isolantes como os semicondutores são materiais que não conduzem corrente elétrica, isto é, são cristais que possuem o estado fundamental formado apenas com bandas totalmente preenchidas ou totalmente vazias, com a banda de valência completamente cheia. Mas a uma temperatura ambiente, os semicondutores conduzem corrente elétrica. Já os condutores, também chamados de metais, são materiais que conduzem mesmo à temperatura de 0K . A última banda dos materiais metálicos encontra-se semi-preenchida. Essa abundância de estados eletrônicos disponíveis no interior da banda faz com que os portadores necessitem de pouquíssima energia para serem excitados para os níveis eletrônicos vizinhos, pois a energia de ligação no estado fundamental é muito pequena. Por isso, no estado excitado os portadores podem ser considerados praticamente livres, tal que a aplicação de um campo elétrico externo altera os estados dos elétrons, resultando em uma corrente elétrica. Portanto, em um metal, a zona proibida de energia

é nula, e por isso os metais apresentam uma alta condutividade.

No caso em que a temperatura é maior que zero, para materiais isolantes e semicondutores, temos que elétrons da banda de valência podem ganhar energia térmica suficiente para atingir a banda seguinte, a banda de condução, que se encontra vazia em $T = 0\text{K}$. Temos que a passagem de elétrons para a banda de condução deixa na banda de valência espaços vazios, estados que se comportam como portadores de carga elétrica positiva, cujo módulo é igual à do elétron, chamados de **buraco**. Dessa forma elétrons e buracos interagem via potencial coulombiano. Denominamos *exciton* o par elétron-buraco, ligados pela atração de Coulomb. Entretanto, como é composto por uma carga positiva e outra negativa, ao todo ele é neutro, não contribuindo diretamente para a condutividade elétrica. Falaremos mais sobre exciton na Seção 1.9.

A condutividade elétrica do material depende do número de elétrons na banda de condução, onde este número pode ser tão maior quanto maior for a temperatura e menor for a energia que separa as duas bandas, E_g a energia do *gap*. Quanto maior a largura da zona proibida de energia, maior a dificuldade que os portadores têm para realizar transições entre a banda de valência e a banda de condução sob uma excitação externa, e menor a condutividade do material. A diferença entre os semicondutores e isolantes está relacionada ao tamanho do *gap*. Quando a largura da zona proibida de energia tem um valor elevado, em geral, acima de 2 eV, o material é considerado isolante, pois os portadores precisam ganhar muita energia para ocupar estados excitados; já se o *gap* for da ordem de 1 eV, o material será um semicondutor. Portanto, resumindo, os cristais semicondutores são materiais isolantes a $T = 0\text{K}$, pois nesta temperatura sua banda de valência está cheia e a banda de condução vazia, mas que têm E_g relativamente pequena e condutividade significativa à temperatura ambiente, possuindo um número de elétrons na banda de condução maior que em relação a um isolante, mas ainda muito menor que o número de elétrons livres em um metal, apresentando portanto uma condutividade muito menor que as dos metais [7]. Na Figura 16, esquematizamos a diferença entre semicondutores, isolantes e metais, mostrando o preenchimento das bandas de valência e condução e o tamanho do *gap*.

Exemplos dos elementos que podem formar os materiais semicondutores estão mostrados na Tabela 2. Os elementos da coluna IV da Tabela 2 podem compor cristais de um único elemento. Esses cristais são formados por ligações covalentes com uma estrutura cristalina igual à do diamante. Devido ao tipo de ligação, cristais constituídos pelos elementos das colunas III e V, como por exemplo GaAs, podem, a princípio, ser usados em

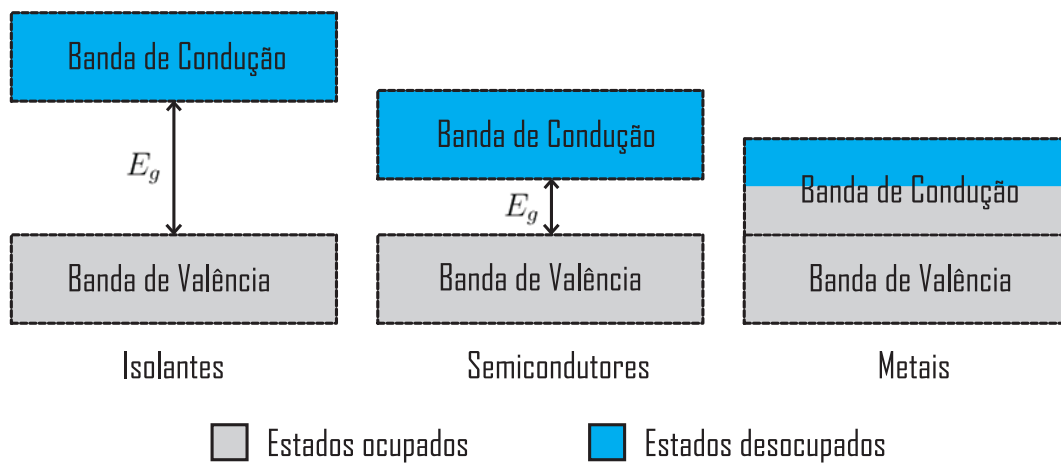


Figura 16: Esquema das bandas de valência e de condução de materiais semicondutores, isolantes e condutores, onde as regiões em cor cinza representam a ocupação de elétrons para o estado fundamental, $T = 0K$. Os materiais semicondutores possuem um *gap* de energia da ordem de $K_B T$, ao contrário dos isolantes, que tipicamente têm um *gap* muito maior que $K_B T$. Já os metais possuem a banda de condução semi-preenchidas à $0K$.

dispositivos eletrônicos como semicondutores. Já alguns cristais constituídos por componentes II-VI ou componentes I-VII, formados por outros tipos de ligação, são raramente utilizados em dispositivos eletrônicos [16].

Tabela 2: Parte da tabela periódica que contem alguns elementos capazes de formar compostos semicondutores.

I	II	IIa	III	IV	V	VI	VII
H							
Li	Be		B	C	N	O	F
Na	Mg		Al	Si	P	S	Cl
K	Ca	...Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
Rb	Sr	...Cd	In	Sn	Sb	Te	I
Cs	Ba	...Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At

Os elementos da Tabela 2 compõem semicondutores intrínsecos como o silício (Si) e o germânio (Ge), compostos binários dos tipos II-VI, como o sulfeto de zinco (ZnS) e o sulfeto de cádmio (CdS), III-V como o arseneto de gálio (GaAs) e o fosfeto de Índio (InP), IV-VI como o sulfeto de chumbo (PbS), o telureto de chumbo (PbTe) e o seleneto de chumbo (PbSe) ou ainda um composto ternário (como o InGaAs) ou quaternário.

1.4 Massa efetiva

Quando estamos estudando as propriedades elétricas dos metais e dos semicondutores é de grande importância averiguar o comportamento do movimento dos portadores de

carga, elétrons ou buracos, na rede cristalina desse material, devido à ação de um campo elétrico externo [7, 9]. Para fazermos tal análise poderíamos aplicar diretamente a segunda lei de Newton $\vec{F} = d\vec{p}/dt$ para o movimento do elétron com momento $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ sob ação de uma força externa devido à um campo elétrico, mas deveríamos verificar se o potencial periódico da rede cristalina causaria um grande efeito sobre o movimento do portador de carga.

Para tratarmos o movimento de um portador dentro de um cristal usaremos o conceito de pacote de onda, que consiste em um grupo de ondas com energia constante, que se movimenta com velocidade de grupo dada por

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial\kappa}, \quad (1.31)$$

e sendo

$$E = \hbar\omega \quad (1.32)$$

a energia do elétron temos que

$$\frac{\partial E}{\partial\kappa} = \frac{\partial E}{\partial\omega} \frac{\partial\omega}{\partial\kappa} = \hbar v_g. \quad (1.33)$$

Se o elétron for submetido a uma força externa \vec{F} , de um campo elétrico, por exemplo, sua energia varia dE durante um percurso dx . O trabalho realizado será, utilizando a Eq. (1.33):

$$dE = F dx = \hbar v_g d\kappa. \quad (1.34)$$

Aplicando a definição de velocidade, sendo $dx = v_g dt$, temos portanto que

$$F = \hbar \frac{d\kappa}{dt}, \quad (1.35)$$

onde $\hbar\kappa$ é o momento do portador de carga. Este resultado já era esperado, pois sendo $\hbar\kappa$ o momento do elétron, a Eq. (1.35) nada mais é que a representação do princípio fundamental da dinâmica, a segunda lei de Newton. Entretanto, como já tínhamos comentado, este resultado é muito interessante pois talvez esperássemos que o potencial da rede cristalina tivesse efeito sobre o movimento. Portanto, vemos que a rede não altera a forma da equação da variação do momento, altera a dependência da energia com o momento, que corresponde a uma variação da massa do elétron. Para demonstrar isso encontraremos a aceleração do elétron em função de E e κ a partir da relação (1.34)

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial\kappa \partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial\kappa^2} \frac{d\kappa}{dt}. \quad (1.36)$$

Substituindo a Eq. (1.35) na Eq. (1.36), temos que

$$F = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial \kappa^2} a. \quad (1.37)$$

Tendo em vista a segunda lei de Newton ($F = ma$), e comparando-a com a Eq. (1.37),

$$F = m^* a = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial \kappa^2} a, \quad (1.38)$$

identificamos a massa efetiva com sendo

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial \kappa^2}. \quad (1.39)$$

Portanto, sob a ação de um campo externo em um cristal os portadores agem da mesma forma que um elétron livre, porém com uma massa diferente, a qual chamamos de massa efetiva, dada pela Eq. (1.39).

Este resultado foi obtido supondo que a energia E só depende do módulo de \vec{k} , porém ela também depende da sua direção. Dessa forma, sendo mais geral, a massa efetiva não é uma grandeza escalar e sim uma grandeza tensorial, representada por um tensor cujo elemento $\alpha\beta$ é dado por

$$m_{\alpha,\beta}^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial \kappa_\alpha \partial \kappa_\beta}, \quad (1.40)$$

o que é válido para portadores tanto em metais como em semicondutores.

Este resultado também é válido para o caso de elétrons livres: como sabemos, sua relação de dispersão é $E = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$, sendo a mesma em todas as direções, isto é, isotrópica, tal que derivando-a encontramos $\partial^2 E / \partial \kappa^2 = \hbar/m$. Da Eq. (1.39), vemos que a massa efetiva do elétron livre é sua própria massa, isto é, $m^* = m$.

Como a massa efetiva na Eq. (1.39) depende da curvatura da banda de energia $E(k)$, e as curvaturas da banda de condução e da banda de valência são diferentes, podemos concluir que as massas efetivas tanto para o elétron como para o buraco nas bandas de condução e valência são também diferentes. De fato, é fácil ver, utilizando a Eq. (1.39), que a massa efetiva de um elétron na banda de valência deve ser negativa, devido à curvatura ter concavidade negativa. Para averiguar a massa efetiva do buraco em cada banda, inicialmente, analisaremos o comportamento dinâmico do buraco sob a aplicação de um campo elétrico em uma das direções, escolhida aqui a direção x , $\vec{E} = \varepsilon_x \hat{x}$. Suponha-se a princípio, antes de aplicar o campo, que só exista um estado vazio e que este está localizado no topo da banda de valência, com $k_x = 0$, de forma que a soma de todos os

momentos dos elétrons seja nula. Após a aplicação do campo, todos os elétrons tendem a deslocar-se no sentido negativo de k_x , pois $-e\varepsilon_x = dp_x/dt = \hbar dk_x/dt$, resultando em um deslocamento do estado vazio no mesmo sentido que do movimento dos elétrons. Como todos os estados estão ocupados, temos que a existência de um estado vazio com momento $-\hbar k_1$, implicará em um momento total do sistema $+\hbar k_1$. Assim, podemos notar que o sistema se comporta como se fosse constituído por um buraco de vetor de onda $\vec{k}_h = -\vec{k}_e$. Dessa forma, substituindo este momento do buraco na Eq. (1.35), da força proveniente do campo elétrico com a carga do buraco (positiva), e efetuando de maneira análoga ao desenvolvimento feito para o caso do elétron, chegamos à conclusão que a massa efetiva para buracos é dada por

$$m_h^* = -\frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2}. \quad (1.41)$$

Analisando agora a massa efetiva para buracos na banda de valência, vemos que esta resulta em um valor positivo, tal que ao aplicarmos um campo elétrico da forma $\vec{E} = \varepsilon_x \hat{x}$ observaremos que os buracos se deslocaram no sentido positivo do eixo x , contrário ao movimento dos elétrons. Outro ponto importante a respeito da massa efetiva para os buracos está ligado ao fato de alguns materiais apresentarem mais de uma banda de valência, como esboçado na Figura 17. Como a massa efetiva é inversamente proporcional à curvatura, $\partial^2 E / \partial k^2$, então os buracos na banda de valência que apresenta menor curvatura terão maior massa efetiva, sendo chamados de buracos pesados, enquanto aqueles que se localizam na banda de valência com maior curvatura apresentam uma menor massa efetiva, sendo chamados de buracos leves.

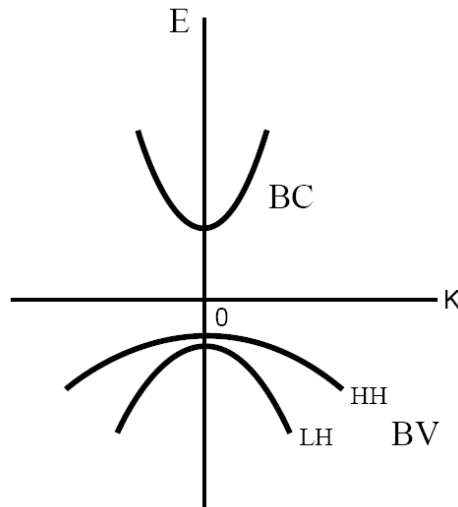


Figura 17: Representação esquemática das bandas de condução (BC) e de valência (BV). Para a banda de valência, apresentam-se as bandas para buracos pesados (HH, heavy hole) e leves (LH, light hole) [17].

Para estudar e analisar com mais detalhes a teoria da massa efetiva, assim como a teoria da estrutura de bandas, aconselha-se ver as referências [7, 13, 16, 18, 19].

1.5 Heteroestruturas

Como sugere o nome, heteroestruturas semicondutoras são estruturas formadas quando dois ou mais tipos diferentes de semicondutores são justapostos, formando heterojunções de semicondutores. A formação dessas estruturas só foi possível graças ao desenvolvimento e aprimoramento de técnicas de crescimento de cristais, tais como *Molecular Beam Epitaxy* (*MBE*) e *Metal-Organic Chemical Vapour Deposition* (*MOCVD*) [7, 17, 18], ocorridos nos anos 1970, que possibilitaram depositar camadas atômicas individuais, permitindo uma configuração cristalina de finas camadas formadas por diferentes materiais semicondutores, pois até os anos 1960 os dispositivos semicondutores eram baseados apenas em materiais do tipo bulk. Os pioneiros nesse tipo de trabalho foram Zhores I. Alferov e Herbert Krömer, agraciados com o Prêmio Nobel em 2000 pelo desenvolvimento de heteroestruturas semicondutoras usadas em dispositivos de alta velocidade e em optoeletrônica, seguindo o trabalho de R. Tsu e L. Esaki [20], que deram os primeiros passos em 1970, propondo um estudo sobre transporte eletrônico em superredes. Somente em 1974 foram publicadas as primeiras observações experimentais das heteroestruturas [21].

Quando se unem dois materiais semicondutores diferentes, duas propriedades podem variar com a posição ao longo da heterojunção: o espaçamento interatômico e a largura da zona proibida de energia [7]. Como geralmente os *gaps* de energia desses materiais que compõem essas junções são diferentes, ao unirmos dois semicondutores (A e B) ocorrerá uma descontinuidade nas bandas de energia da estrutura resultante, tal que o alinhamento das bandas de condução e de valência nesse sistema se comportará como degraus de potencial para o movimento de portadores na direção de crescimento da estrutura, como ilustrado na Figura 18.

Na Figura 18, vemos que se crescermos uma heteroestrutura formada por um material A entre dois materiais B, teremos agora, em vez de potenciais degrau, a formação de poços e barreiras de potencial para o elétron e o para o buraco, como se pode ver na Figura 19(a). A repetição na composição variada de camadas de diferentes materiais semicondutores, gerando um potencial periódico, chama-se de superrede, sendo as mais comuns, as superredes do tipo $\mathbf{A/B/A\dots/B}$, apresentadas esquematicamente na Figura 19(b).

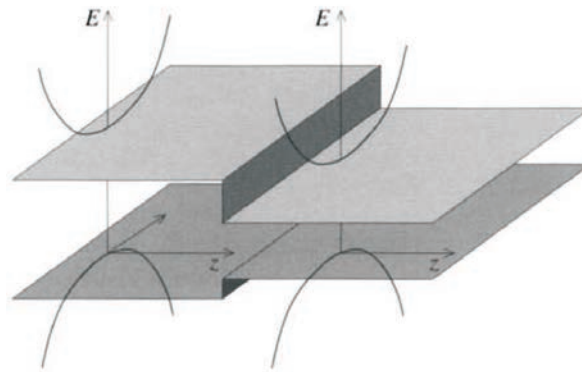


Figura 18: Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores com *gaps* diferentes, formando degraus de potencial para o elétron na banda de condução e para o buraco na banda de valência [19].

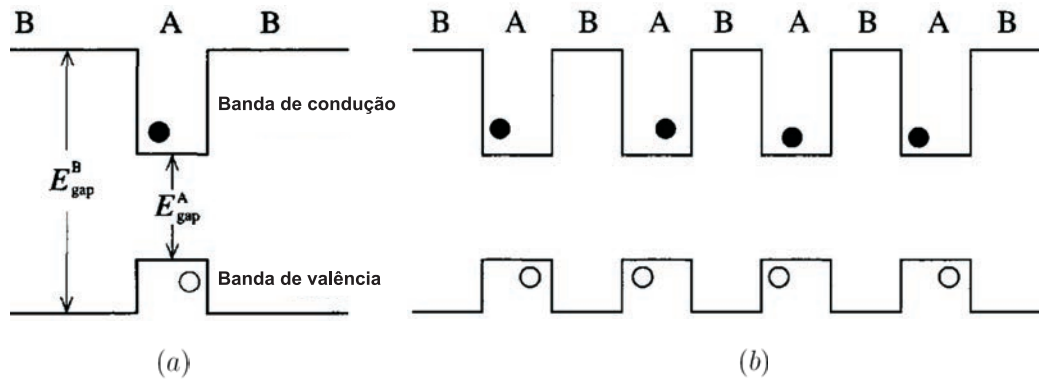


Figura 19: Representação esquemática do potencial gerado por (a) uma heterojunção do tipo A/B/A entre dois semicondutores diferentes e (b) uma superrede de semicondutores A e B [19].

Com relação à forma do alinhamento das bandas, os materiais resultantes podem ser classificados em Tipo-I e Tipo-II. Quando o alinhamento das bandas ocorre de maneira a termos, em uma mesma camada, um poço de potencial tanto para elétrons como para buraco, como na Figura 20(a), onde os círculos pretos representam os elétrons, e os brancos os buracos, teremos uma heteroestrutura Tipo-I. Já no caso em que não temos essa forma de alinhamento, os elétrons e buracos serão confinados em camadas diferentes do semicondutor, como mostra a Figura 20(b), podendo para um portador, em uma determinada camada, haver uma barreira de potencial, e para o outro portador um poço de potencial. Essa heteroestrutura é classificada como Tipo-II. No presente trabalho, consideraremos apenas semicondutores Tipo-I.

As propriedades eletrônicas dos portadores confinados dependem de características físicas dos poços, como largura e profundidade. A profundidade é determinada pela diferença entre as bandas de condução dos dois materiais e a largura pode ser controlada durante o crescimento das camadas do material. Estes conceitos de heterojunções são fun-

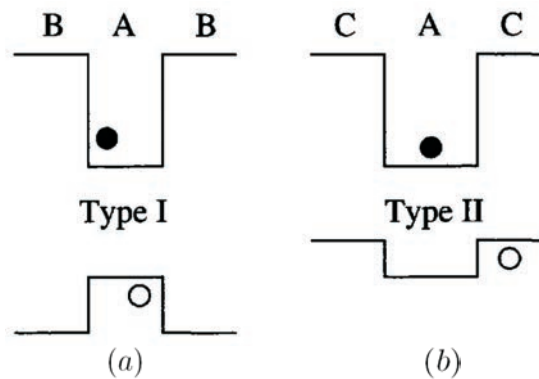


Figura 20: Representação esquemática do alinhamento das bandas de condução e de valência gerado por uma heteroestrutura (a) Tipo-I e (b) Tipo-II [19].

damentais na construção de estruturas de baixa dimensionalidade, descritas brevemente na Seção 1.6. São exemplos desses sistemas heteroestruturados, com perfis eletrônicos capazes de confinar portadores de cargas em diferentes dimensões, os poços, os fios, os pontos e os anéis quânticos. Quando o confinamento ocorre em apenas uma dimensão teremos um sistema bidimensional(2D) chamado de poço quântico, onde o portador de carga está livre em duas direções. Já para um confinamento em duas dimensões teremos um sistema unidimensional(1D) chamado de fio quântico, e para um confinamento tridimensional teremos um sistema zero dimensional(0D) chamado de ponto quântico. Um esquema dessas estruturas está representado na Figura 21. Esses sistemas têm propriedades ópticas e eletrônicas diferentes daquelas encontradas em materiais *bulk*. Como exemplo, o movimento destes portadores torna-se quantizado nessas estruturas, causando alterações nas suas propriedades dinâmicas e uma discretização, como veremos na Seção 1.6, no espectro energético, ao contrário do material *bulk* que apresenta bandas de energia contínuas.

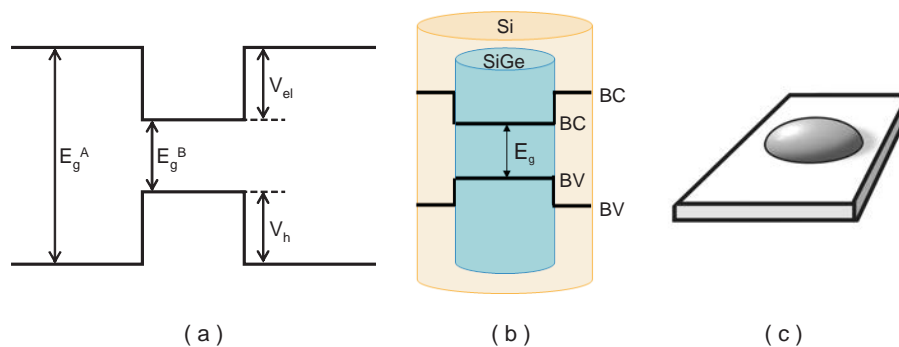


Figura 21: Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores diferentes: (a) formando um potencial de confinamento em um poço, (b) em um fio quântico e (c) em um ponto quântico.

1.6 Confinamento quântico

Vimos na seção anterior que a junção entre materiais com *gaps* de energia diferentes origina um potencial de confinamento⁹, devido ao não alinhamento das bandas de condução e de valência na direção de crescimento da estrutura. Os efeitos desse confinamento nas nanoestruturas semicondutoras são tais que, além de reduzir os graus de liberdade do sistema, confinando os portadores de carga em uma pequena região do espaço com cerca de algumas dezenas de nanômetros ou menos, afeta profundamente seu espectro de energias permitidas, tornando-as discretas na direção de crescimento da heteroestrutura, diferentemente do que acontece em semicondutores cristalinos tridimensionais, os materiais *bulks*, em que o espectro de energia é quase-contínuo, pois nesse caso os portadores estão livres nas três direções.

As diferentes propriedades dos sistemas semicondutores com baixa dimensionalidade têm atraído bastante o interesse da comunidade científica, que criou nos últimos anos heteroestruturas com diferentes geometrias. O efeito do confinamento pode ser encontrado na descrição de sistemas como poços, fios, pontos e anéis quânticos, sendo respectivamente sistemas $2D$, $1D$ e $0D$, em que os níveis de energia permitidos tornam-se discretos em sistemas $0D$ e formam sub-bandas nas direções de confinamento em sistemas $1D$ e $2D$. Dessa forma, os portadores estão limitados a mover-se no plano de um poço quântico, na linha de um fio quântico ou em ilhas em pontos quânticos. Alguns sistemas de baixa dimensionalidade, tais como o fio quântico e o ponto quântico, são comumente chamados, respectivamente, de nanofios e átomos artificiais. Os pontos quânticos recebem tal nomenclatura pois, tais como os átomos, as energias dos elétrons são quantizadas e a carga total é restrita a um pequeno número inteiro de elétrons [26].

Se o movimento dos portadores em um sólido é limitado a uma região de dimensões da ordem do comprimento de onda de de Broglie, observam-se efeitos de quantização da energia. Assim, a escala de comprimento dos dispositivos formados por esses sistemas de dimensionalidade reduzida deve ser da ordem do comprimento de onda de Broglie do portador [26]. O comprimento de onda de de Broglie depende da massa efetiva do

⁹O potencial de confinamento, como já comentamos, origina-se a partir da fração da diferença entre os *gaps* de energia dos materiais semicondutores que formam a heterojunção. A grandeza que representa essa fração é denominada de *band-off-set* e a sua determinação é um ponto de extrema importância para a física de semicondutores de sistemas de dimensionalidade reduzida. O *band-off-set* é uma característica do material, obtida por meios experimentais [22, 23, 24, 25].

portador m^* e da temperatura, como segue [9, 11]:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3m^*K_B T}}. \quad (1.42)$$

Os efeitos de quantização podem ser pronunciados mesmo em estruturas de 10 a 100 vezes maiores que a constante de rede. Nesta seção, quando discutimos sobre o confinamento em heteroestruturas não fizemos nenhum comentário sobre a variação da massa efetiva devido à mudança de material na direção de crescimento da estrutura, pois como se pode ver nas referências [27] e [28], isto não afeta qualitativamente os resultados, de forma significativa.

A dimensionalidade está intimamente ligada ao número de graus de liberdade, tal que o número de graus de liberdade D_l e o número de direções de confinamento D_c nestes sistemas de dimensionalidade reduzida devem obedecer à seguinte equação [19]:

$$D_l + D_c = 3. \quad (1.43)$$

A Tabela 3 mostra resumidamente quatro tipos de sistemas de baixa dimensionalidade e seus respectivos números de graus de liberdade e de dimensionalidade. De fato, no fio quântico o portador está confinado em duas direções e livre em uma. Já no poço quântico, o portador está confinado só em uma dimensão e livre nas outras duas, e no ponto e anel quântico o portador está confinado nas três dimensões, sendo portanto o grau de liberdade zero, isto é, um sistema zero dimensional (ver Figura 22).

Tabela 3: Sistemas de dimensionalidade reduzida e seus respectivos números de graus de liberdade D_l e de direções de confinamento D_c

Sistemas	D_l	D_c
Bulk	3	0
Poço Quântico	2	1
Fio Quântico	1	2
Ponto Quântico	0	3

A energia do portador movendo-se livremente em um material *bulk* é dada por

$$E = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m^*}, \quad (1.44)$$

onde $k_{x,y,z}$ são os vetores de onda nas três dimensões.

Portanto, para sistemas bidimensionais, como o caso de poços quânticos, onde o por-

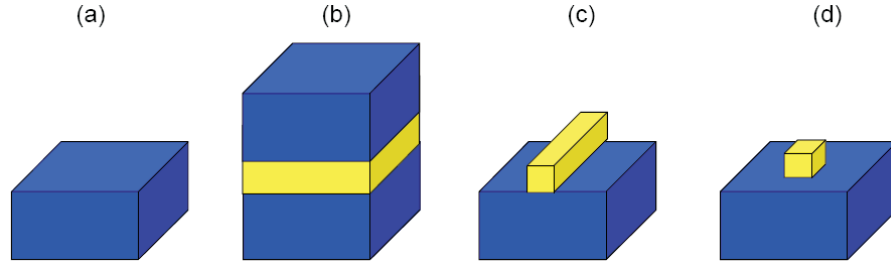


Figura 22: Confinamento das heteroestruturas em relação à dimensionalidade, de um material bulk-3D (a) até o ponto quântico-0D (d), passando por um poço-1D (b) e um fio quântico-2D (c).

tador move-se em uma direção e é livre no plano, temos

$$E = E_{x,y} + E_z^n = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} + E_z^n, \quad (1.45)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$, onde o espectro é contínuo para as energias ao longo dos eixos x e y , pois não temos nenhuma restrição sobre os valores de k_x e k_y , e é quantizado somente para o movimento na direção z , $E_z = E_z^n$. As energias $E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}$ e $E_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}$ representam as energias cinéticas de um portador propagando-se ao longo dos eixos x e y , respectivamente. Assim, o movimento do portador de carga confinado acontece no plano xy , devido a um potencial unidimensional, como mostra a Figura 23. Adicionando um confinamento lateral para o movimento do portador teremos um sistema unidimensional, como um fio quântico, onde os portadores estão livres apenas na direção x levando a energias

$$E = \frac{\hbar^2(k_x^2)}{2m^*} + E_y^m + E_z^n, \quad (1.46)$$

com $m = 1, 2, 3, \dots$. Finalmente, quando o portador está confinado em todas as direções, como no ponto e anel quântico, temos

$$E = E_x^l + E_y^m + E_z^n, \quad (1.47)$$

com $l = 1, 2, 3, \dots$, obtendo o espectro de energia completamente discreto. Neste trabalho, estudaremos apenas o confinamento de portadores de carga em uma estrutura diferente sobre certas aproximações, chamada de anel quântico, que também apresenta um confinamento tridimensional como o ponto quântico.

1.7 Anéis quânticos

Os anéis quânticos são formados a partir de grandes pontos quânticos, constituídos de um material A sobre um substrato de um outro material B, como mostrado na Figura

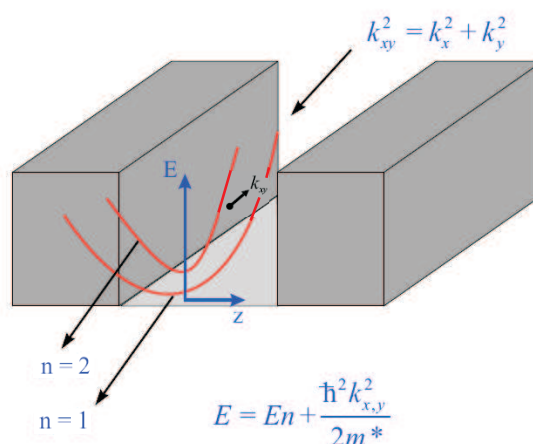


Figura 23: Representação do movimento de um portador no plano do poço, apresentando um diagrama esquemático das curvas de dispersão ($k_{x,y}$) no plano xy e estrutura das sub-bandas [19].

24, assemelhando-se ao formato de uma bolha. Nesse estágio, os pontos quânticos são submetidos a um processo de *annealing*, um “recozimento”, em uma temperatura elevada, ocorrendo alterações na sua geometria tal que o ponto quântico original adquire uma cavidade interna axialmente simétrica, como apresentado na Figura 25. Em seguida, o sistema é coberto pelo mesmo material B do substrato, para desestabilizá-lo. Dessa forma, obtém-se um tipo de ponto quântico topologicamente alterado, que recebe a denominação de anel quântico. Os anéis quânticos podem ser obtidos de diferentes materiais, como por exemplo, por um grande ponto quântico de GaAs, coberto por uma camada de Ga(Al)As [25, 29, 30, 31], ou utilizando-se InGaN/GaN [32], In(Ga)As [33] (ver Figura 26), InAs/InP [33], dentre outros.



Figura 24: Imagem de um ponto quântico InAs/GaAs, obtida por Microscopia de Força Atômica [17].

Esta nova forma geométrica de confinar portadores tem atraído muito a atenção de pesquisadores nos últimos anos, graças a recentes avanços no crescimento de estruturas semicondutoras e da litografia, que tornou possível a fabricação dessas estruturas com alta qualidade e com dimensões bem controladas. Os anéis quânticos são intensivamente estudados, em especial por terem propriedades eletrônicas bem atípicas, distintas das apre-

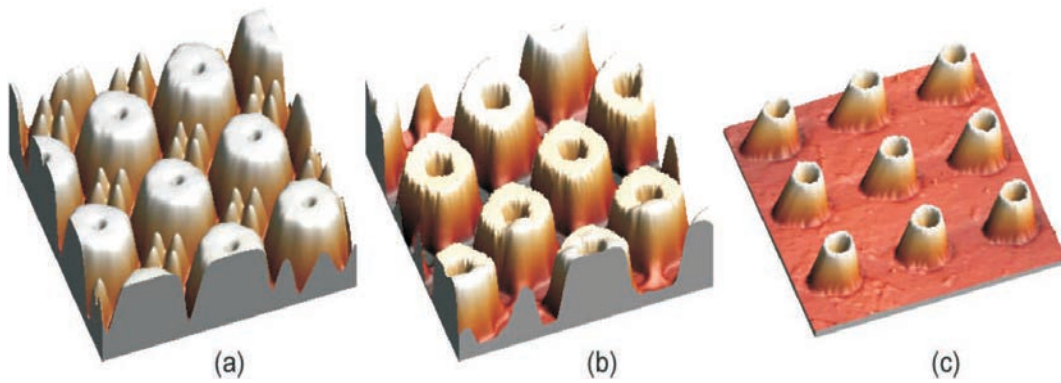


Figura 25: (a), (b), (c) Imagens de Microscópio de Força Atômica ilustrando a evolução de um anel quântico de InGaN [32].

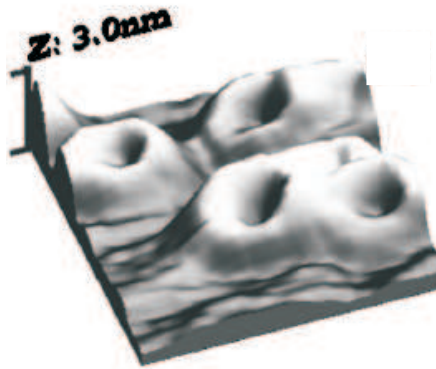


Figura 26: Imagem de anéis quânticos In(Ga)As obtida por Microscopia de Força Atômica (AFM) [33].

sentadas nos pontos quânticos que os originaram. Por exemplo, eles possuem momento de dipolo gigante [34, 35, 36], devido à separação espacial entre o elétron e o buraco, alta força de oscilação de transição de banda a banda do estado fundamental e a possibilidade de ajustar seus estados eletrônicos de diferentes maneiras [37].

Outro aspecto bastante interessante dessa estrutura está relacionado à combinação das propriedades ópticas das nanoestruturas auto-crescidas com as características singulares observadas devido à aplicação de campos magnéticos, originadas pela forma topológica diferente do anel [38]. Os efeitos da presença de campo magnético em anéis quânticos são bem conhecidos na literatura, devido ao efeito Aharonov-Bohm, no qual ocorrem oscilações na energia do elétron, na probabilidade de transmissão e na intensidade da luminescência em função do fluxo magnético [39, 40, 41, 42, 43] como explicaremos mais detalhadamente na próxima seção. Os estudos dos estados eletrônicos em anéis quânticos na presença de campos externos têm indicado que as propriedades ópticas e os estados eletrônicos dessas estruturas são fortemente afetados por impurezas e imperfeições na geometria do sistema [44, 45, 46]. Considerando-se um anel quântico cada vez mais realístico,

incluindo a presença de impurezas, ou um campo elétrico, ou mesmo se considerarmos efeitos da rugosidade, devido às imperfeições na geometria do anel, temos sempre modificações significativas sobre o espectro de energia do sistema, devido à quebra da simetria do mesmo. Esta quebra depende, por exemplo, do número de impurezas, da maneira como elas estão arranjadas, da presença de uma superrede ao longo do anel, da presença de um campo elétrico no plano do anel, entre outros pontos como mostraremos nos capítulos seguintes. Isso leva a resultados bastantes interessantes e diferentes dos resultados de um anel idealizado, como pode ser visto nas referências [31, 46, 47, 48].

No estudo das propriedades excitônicas em anéis quânticos, diferentes modelos, abordando diferentes formas de potenciais de interação elétron-buraco, têm sido considerados. Era de se esperar que o exciton, sendo uma entidade neutra, não fosse sensível ao fluxo magnético, isto é, não apresentasse efeito Aharonov-Bohm (AB), mas o que se tem encontrado são oscilações Aharonov-Bohm para excitons criados opticamente em anéis quânticos. O efeito Aharonov-Bohm e o papel da interação elétron-buraco no espectro de energia do exciton no anel pode ser encontrado em trabalhos como os dados nas referências [49, 50, 51, 52, 53, 54].

1.8 Efeito Aharonov-Bohm

Como neste trabalho iremos estudar elétrons em um anel quântico sob um campo magnético aplicado, é importante primeiramente discutir sobre o efeito Aharonov-Bohm, problema fundamental da mecânica quântica [18, 55], já que, como comentamos na Seção 1.7, aparece nas propriedades espectrais das nanoestruturas formadas por anéis quânticos.

O israelense Yakir Aharonov e o norte-americano David Joseph Bohm publicaram em 1959 um artigo [56] no qual apresentaram claramente a importância física do potencial vetor \vec{A} , por intermédio de um fenômeno quântico de interferência. Eles discutiram, nesse famoso artigo, algumas propriedades dos potenciais eletromagnéticos no domínio quântico, e mostraram, ao contrário das conclusões da mecânica clássica, em especial da eletrodinâmica clássica, em que os potenciais φ (potencial escalar) e \vec{A} não são diretamente mensuráveis e que as quantidades físicas são somente os campos elétricos e magnéticos

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \quad \text{e} \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad (1.48)$$

que existem efeitos do potencial vetor nas partículas carregadas, mesmo nas regiões onde o campo magnético é nulo. Também propuseram possíveis experimentos para testar suas

conclusões, realizados em 1960 [57] e novamente em 1961 [58], comprovando a igual relevância dos potenciais assim como os campos.

De maneira geral, vamos aqui supor que uma partícula está se movendo através de uma região onde o campo magnético \vec{B} é zero, tal que $\vec{\nabla} \times \vec{A} = 0$, mas com \vec{A} diferente de zero. Assumiremos aqui o caso estático, embora o método possa ser generalizado para potenciais dependentes do tempo. O Hamiltoniano para esse sistema é:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\vec{A} \right)^2 + U, \quad (1.49)$$

com a energia potencial U , que pode incluir também uma contribuição elétrica, isto é, $U = q\varphi$. Assim, a equação de Schrödinger dependente do tempo torna-se

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\vec{A} \right)^2 + U \right\} \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (1.50)$$

A Eq. (1.50) pode ser simplificada escrevendo-se a função de onda Ψ como

$$\Psi = e^{ig(\vec{r})} \Psi', \quad (1.51)$$

já que a teoria quântica, assim como a eletrodinâmica clássica, é invariante sobre uma transformação de gauge para os potenciais, dada por:

$$\begin{aligned} \vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda \\ \varphi &\rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial}{\partial t}\Lambda \end{aligned} \quad (1.52)$$

onde $\Lambda(\vec{r}, t)$ é uma função arbitrária. Em outras palavras, os potenciais dados após a transformação de *gauge* não levam a qualquer mudança na física do problema, tal que podemos escrever de maneira análoga uma transformação da função de onda dada pela Eq. (1.51), tendo uma arbitrariedade na escolha da função $g(\vec{r})$, que aqui tomaremos como

$$g(\vec{r}) \equiv \frac{q}{\hbar} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' \quad (1.53)$$

com \vec{r}_0 sendo algum ponto de referencial cuja escolha também é arbitrária. É bom notar que essa escolha da função $g(\vec{r})$ só faz sentido se de fato $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = 0$, ao longo da região em questão, pois, caso contrário, a integral de linha deveria depender de uma fase tomada de \vec{r}_0 a \vec{r} , e conseqüentemente não se definiria uma função de \vec{r} . Fazendo a substituição de Ψ dada pela Eq. (1.51) na equação de Schrödinger Eq. (1.50), aplicando

primeiramente o operador momento em Ψ , temos que

$$\vec{\nabla}\Psi = e^{ig(\vec{r})}(i\vec{\nabla}g(\vec{r}))\Psi' + e^{ig(\vec{r})}(\vec{\nabla}\Psi'), \quad (1.54)$$

mas como o gradiente de g é:

$$\vec{\nabla}g = \left(\frac{q}{\hbar}\right)\vec{A}, \quad (1.55)$$

então

$$\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)\Psi = \frac{\hbar}{i}e^{ig(\vec{r})}\vec{\nabla}\Psi', \quad (1.56)$$

portanto

$$\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)^2\Psi = -\hbar^2e^{ig(\vec{r})}\nabla^2\Psi'. \quad (1.57)$$

Substituindo a Eq. (1.57) na Eq. (1.50) e cancelando os fatores comuns ($e^{ig(\vec{r})}$), temos que

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi' + U\Psi' = i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t}, \quad (1.58)$$

mostrando que Ψ' satisfaz a equação de Schrödinger, agora sem a presença do termo \vec{A} , isto é, mostrando realmente que a equação regente do problema não se altera após a escolha da nova função de onda, tal que essa transformação não modifica a física do problema.

Um dos experimentos propostos por Aharonov e Bohm foi o de dupla fenda modificado, onde feixes de elétrons passam pelas fendas, e entre elas posiciona-se um solenóide cilíndrico longo, o qual gera um campo magnético \vec{B} em seu interior diferente de zero, e um campo magnético nulo nas regiões fora do solenóide. Com esse experimento, eles esperavam que, quando os elétrons passassem em volta do solenóide, na região de campo magnético nulo, fosse gerado um deslocamento no padrão de interferência sobre o anteparo. Tal experimento está representado na Figura 27.

O campo magnético dentro de um solenóide longo, localizado na direção do eixo z , de raio R , percorrido por uma corrente elétrica i , é constante e uniforme na direção do seu eixo, dado por

$$\vec{B} = n\mu_0i\hat{z}, \quad (1.59)$$

onde n é o número de espirais, μ_0 é a permissividade elétrica. O campo fora do solenóide é zero, mas o potencial vetor não é nulo nessa região, e sim dado por

$$\vec{A} = \frac{n\mu_0iR^2}{2\rho}\hat{\theta}. \quad (1.60)$$

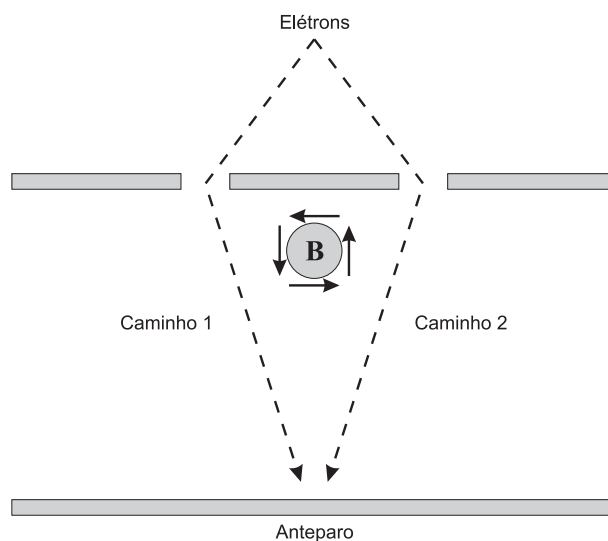


Figura 27: Esquema de um experimento de dupla fenda na presença de um solenóide longo (círculo cinza), que gera um campo magnético \vec{B} em seu interior. As linhas pontilhadas representam os caminhos pelos quais os elétrons passam, e as setas ao redor do solenóide representam a direção do potencial vetor, devido o campo magnético estar na direção perpendicular à folha, saindo da mesma.

Sendo $\phi = \pi R^2 B$ o fluxo magnético através do solenóide temos que a Eq. (1.60) torna-se

$$\vec{A} = \frac{\phi}{2\pi\rho} \hat{\theta}, \quad (1.61)$$

para $\rho > R$. Para ver com maior riqueza de detalhes os cálculos do campo magnético e do potencial vetor nas regiões interna e externa do solenóide indicam-se as referências [59, 60].

Apesar da ausência de campo magnético na região pela qual os elétrons passam, existe, como já vimos, um potencial vetor \vec{A} nesta região, tal que $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = 0$, fazendo com que o momento do elétron neste sistema assumira a forma $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - q\vec{A}$, como visto no Hamiltoniano do sistema, Eq. (1.49). Como o potencial vetor está na direção $\hat{\theta}$, uma vez que assumimos o campo magnético na direção \hat{z} , como ilustrado na Figura 27, onde o potencial vetor está representado pelas setas ao redor do solenóide, vemos que o potencial vetor está em sentido diferente em cada lado do solenóide. Consequentemente, se o potencial vetor estiver no mesmo sentido que o momento \vec{p} , este irá aumentar. Caso contrário, irá diminuir. Assim, de acordo com a Figura 27, para o feixe que percorre o caminho 1, o potencial vetor aponta na mesma direção que o momento dos elétrons, enquanto que para o caminho 2 estes vetores têm direções contrárias. Com isso, os elétrons que passam pelo caminho 1 terão momento diferente daqueles que passam pelo caminho 2, e como a fase da onda do feixe de elétrons está relacionada com seu momento, obteremos que os dois feixes que partem do mesmo ponto e passam ao redor do solenóide,

apresentarão uma diferença de fase proporcional ao fluxo magnético.

A Eq. (1.53) apresenta uma função arbitrária que de fato é a fase da função de onda. De acordo com o experimento descrito acima, e utilizando a Eq. (1.61), temos que as fases da onda para os feixes que percorrem o caminho 1 e o caminho 2 são respectivamente

$$\begin{aligned}
 g_1 &= \frac{q}{\hbar} \int_{C_1} \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{r} \\
 &= \frac{q\phi}{2\pi\hbar} \int \left(\frac{1}{\rho} \hat{\theta} \right) \rho \hat{\theta} d\theta \\
 &= \frac{q\phi}{2\hbar},
 \end{aligned} \tag{1.62}$$

e

$$\begin{aligned}
 g_2 &= \frac{q}{\hbar} \int_{C_2} \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{r} \\
 &= \frac{q\phi}{2\pi\hbar} \int \left[\frac{1}{\rho} (-\hat{\theta}) \right] \rho \hat{\theta} d\theta \\
 &= -\frac{q\phi}{2\hbar}.
 \end{aligned} \tag{1.63}$$

Fazendo uso das Eqs. (1.62) e (1.63), temos que a diferença de fase Δg é

$$\Delta g = g_1 - g_2 = \frac{q\phi}{2\hbar} - \left(-\frac{q\phi}{2\hbar} \right), \tag{1.64}$$

portanto

$$\Delta g = \frac{q\phi}{\hbar} \tag{1.65}$$

ou, em termos do fluxo elementar $\phi_0 = h/e$, também chamado de quantum de fluxo magnético, podemos reescrever a diferença de fase como

$$\Delta g = \frac{2\pi\phi}{\phi_0}. \tag{1.66}$$

Essa diferença de fase produz no anteparo um desvio do padrão de interferência. A esta variação no padrão de interferência dá-se o nome de efeito Aharonov-Bohm. Quando o fluxo magnético na região entre dois caminhos 1 e 2 atinge um valor $\phi = (n + 1/2)\phi_0$, onde n é um inteiro, as funções de onda que percorrem os dois caminhos interferem destrutivamente ao se encontrarem, levando a um valor mínimo na transmissão do elétron. Dessa forma, a transmissão em função do fluxo magnético possui uma oscilação periódica, de periodicidade ϕ_0 , chamada de oscilação Aharonov-Bohm para a transmissão.

Neste trabalho, investigaremos um outro tipo de oscilação Aharonov-Bohm: oscilações

nas autoenergias de um elétron em um anel quântico submetido a um campo magnético aplicado na direção perpendicular ao plano do anel. Como veremos no próximo capítulo, essas oscilações se devem à mudança de fase na função de onda quando o fluxo magnético ϕ que passa através do anel alcança o fluxo magnético quântico, ϕ_0 , levando a oscilações com uma periodicidade ϕ_0 , a mesma para as oscilações na transmissão. Mostraremos que essa mudança de fase também acarreta uma troca periódica de momento angular em ϕ para o estado fundamental.

1.9 Exciton em nanoestruturas

Os dispositivos semicondutores baseiam-se na dinâmica dos portadores de carga elétrica, ou seja, elétrons e buracos. O estudo das interações desses portadores é de grande importância na caracterização das propriedades ópticas de um semiconductor, que se utilizam, por exemplo, das transições do par elétron-buraco em heteroestruturas para diversas aplicações tecnológicas como em dispositivos opto-eletrônicos, como lasers, diodos emissores de luz e fotodetectores [18, 19, 61, 62].

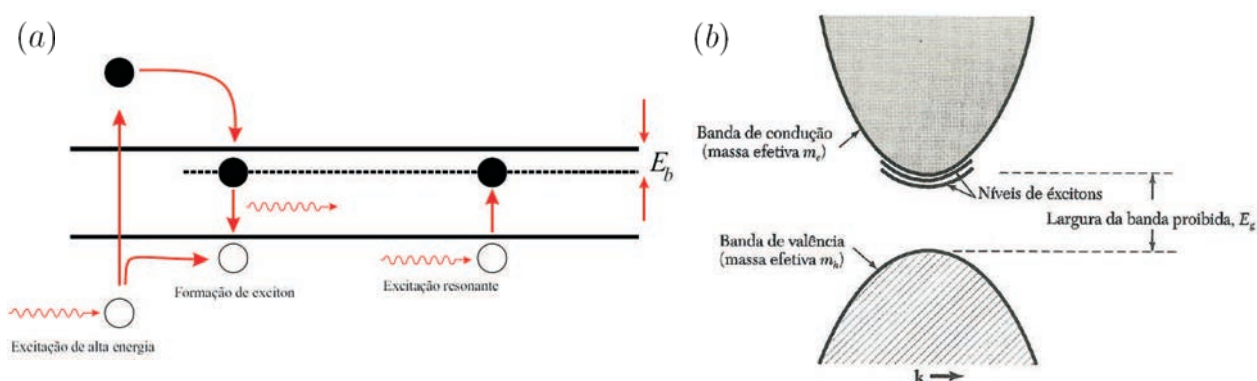


Figura 28: (a) Representação esquemática de geração de excitons [19]. (b) Níveis de energia dos excitons em uma estrutura de bandas simples com *gap* direto, mostrando que os níveis excitônicos estão localizados abaixo da banda de condução [13].

Como já comentamos nas Seções anteriores, quando um elétron é excitado e promovido da banda de valência para a banda de condução, um estado vazio é deixado na banda de valência, como ilustrado na Figura 28(a). Este estado vazio, denominado de buraco, comporta-se como uma partícula de carga positiva que interage com o elétron da banda de condução através de um potencial coulombiano. A este par interagente elétron-buraco dá-se o nome de *exciton*. Para que um par elétron-buraco seja criado, o cristal semiconductor deve absorver um fóton incidente, com a exigência da energia do fóton ser maior do que a

energia do *gap* E_g do material, com o limiar $E_g = \hbar\omega_g$, em um processo direto¹⁰, mostrado na Figura 29(a). Em um processo indireto¹¹, mostrado na Figura 29(b), a transição de um elétron do topo da banda de valência para o mínimo da banda de condução requer uma mudança no vetor de onda. Agora é necessário, além da absorção de um fóton, a participação de um fônon com uma energia $\hbar\Omega$ e um momento não nulo, tal que o limiar de energia é $E_g = \hbar\omega + \hbar\Omega$ [7, 13]. Na Tabela 4 apresentamos as energias do *gap* para vários semicondutores importantes, indicando a natureza do *gap*, direto (d) ou indireto (i). Em nosso trabalho consideramos a natureza do *gap* direto para o GaAs.

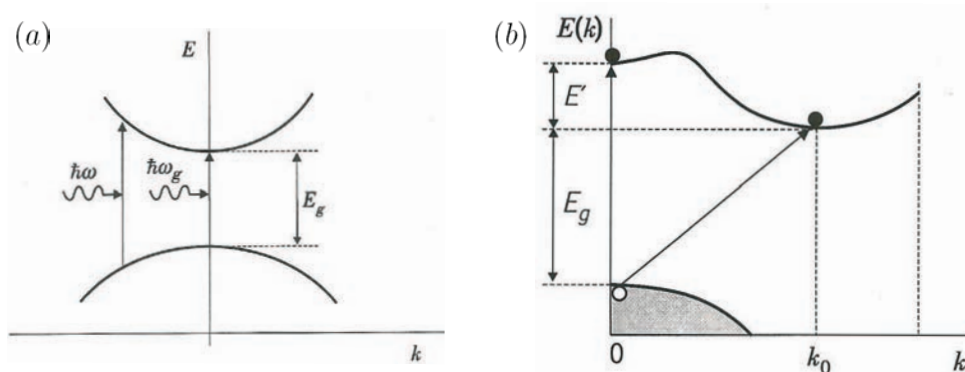


Figura 29: (a) Absorção de fótons em semicondutores de *gap* direto, mostrando o limiar de energia necessária para que aconteça a transição. (b) Transição eletrônica do topo da banda de valência para dois mínimos da banda de condução em semicondutores de *gap* indireto. A transição indireta envolve fônons e tem energia E_g . A transição direta tem energia $E_g + E'$ [7].

Um exciton pode se mover pela rede cristalina e transportar energia, mas não transporta carga, já que é eletricamente neutro, por ser composto por uma partícula positiva, o buraco, e uma negativa, o elétron. Devido à atração coulombiana entre o elétron e o buraco, seus movimentos estão correlacionados, como discutido brevemente na Seção 1.4 [7, 13, 17, 63]. Esse potencial atrativo reduz a energia total do exciton da ordem de E_b , denominada de energia de ligação entre o elétron e o buraco, tal que os níveis de energia de estados excitônicos estão ligeiramente abaixo da banda de condução, como ilustrado na Figura 28(b). Na Tabela 5 apresentamos alguns valores de energias de ligação de excitons E_b para certos semicondutores.

Os excitons podem ser tratados por duas abordagens diferentes, dependendo das propriedades do material, especificamente, da forma do potencial de interação entre o elétron

¹⁰Um processo de transição de *gap* direto envolve apenas a absorção ou emissão de fótons, isto é, o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução neste caso estão alinhados em um mesmo ponto de vetor de onda k . Um exemplo de um semiconductor de *gap* direto em torno do ponto Γ é o GaAs, como pode ser visto na Figura 9.

¹¹Um processo de transição de *gap* indireto envolve a absorção ou emissão de fótons acompanhada pela emissão ou absorção de fônons, isto é, requer uma variação de vetor de onda já que o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução não estão alinhados.

Tabela 4: Energia e natureza, direta (d) ou indireta (i), do *gap* de semicondutores importantes (à temperatura ambiente) [7].

Semicondutor	Gap	E_g (eV)
Si	i	1,12
Ge	i	0,67
AlN	i	5,90
AlAs	i	2,16
GaN	d	3,40
GaP	i	2,26
GaAs	d	1,43
InP	d	1,35
InAs	d	0,35
InSb	d	0,18
CdS	d	2,53
CdTe	d	1,50

e o buraco. No caso do *exciton de Frenkel* [64, 65], a constante dielétrica do material é bastante pequena, a interação coulombiana do par elétron-buraco é bastante forte, tal que a distância entre o elétron e o buraco é pequena, da mesma ordem de grandeza do parâmetro de rede cristalina em questão, possuindo uma energia de ligação muito elevada. O exciton de Frenkel pode se mover no interior do cristal como uma onda, mas o elétron deve sempre se manter nas proximidades do buraco, já que a massa do buraco é geralmente maior que a massa do elétron, de forma que esse sistema deve ser tratado como um problema de dois corpos que se assemelha ao átomo de hidrogênio. Na outra abordagem, denominada de *exciton de Wannier-Mott* [66, 67], a interação entre o elétron e o buraco é fraca. A distância entre eles é grande, em comparação com a constante de rede, e a energia de ligação entre as partículas é pequena. Este caso é encontrado em semicondutores, que possuem constantes dielétricas grandes, cujas propriedades excitônicas podem ser calculadas usando a aproximação da massa efetiva, diferentemente do caso anterior, para excitons de Frenkel, que são encontrados em cristais iônicos. Na Figura 30 representamos um esquema de rede cristalina apresentando os dois tipos de excitons.

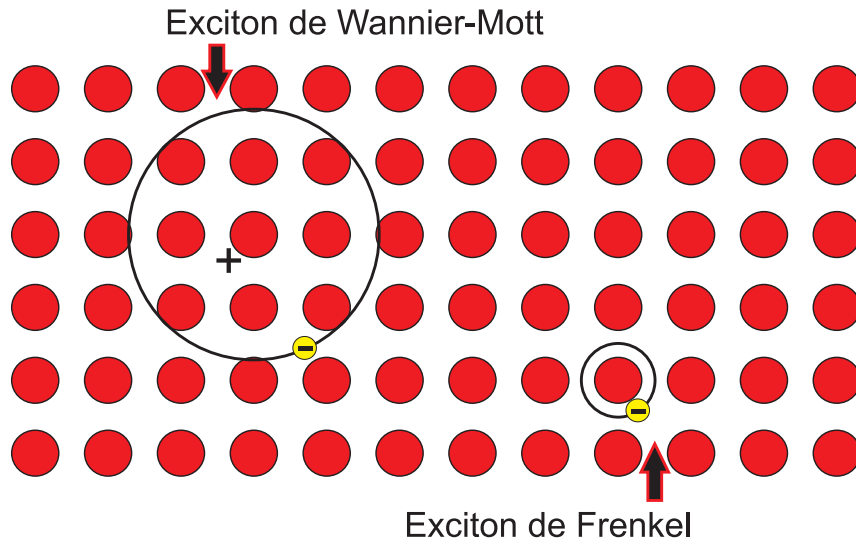
Consideremos agora a energia total do exciton. Em semicondutores cristalinos tridimensionais (*bulk*) a energia total é dada simplesmente pela soma entre a energia do *gap* E_g e a energia de ligação E_b :

$$E_{exc} = E_g - |E_b|. \quad (1.67)$$

Já no caso de sistemas heteroestruturados temos duas componentes adicionais, refe-

Tabela 5: Energias de ligação de excitons E_b [13].

Semicondutor	E_b (meV)
Si	14,7
Ge	4,15
GaAs	4,2
GaP	3,5
CdS	29,0
CdSe	15,0
BaO	56,0
InP	4,0
InSb	0,4
KI	480,0
KCl	400,0
KBr	400,0
RbCl	440,0
AgBr	20,0
AgCl	30,0
TlCl	11,0
TlBr	6,0

**Figura 30:** (a) Representação esquemática mostrando os excitons de Frenkel e Wannier-Mott em uma estrutura cristalina [17, 63].

rentes às energias de confinamento do elétron E_e e do buraco¹² E_h , para a energia total do exciton. Dessa maneira, um elétron que retorna para a banda de valência deve liberar uma quantidade de energia, podendo ser emitida na forma de luz, relativa a seu confinamento na banda de condução, a energia do *gap* do material e a energia de confinamento do buraco na banda de valência. Portanto, temos que a energia total do exciton é dada

¹²O índice h vem da palavra inglesa para buraco, *hole*.

por

$$E_{exc} = E_g + E_e + E_h - |E_b|. \quad (1.68)$$

A energia do exciton pode ser estimada, na aproximação da massa efetiva, resolvendo-se a equação de Schrödinger separadamente para cada confinamento dos portadores, caso consideremos um exciton de Wannier-Mott, como faremos no decorrer desta dissertação.

1.10 Escopo do trabalho

Os próximos capítulos estão organizados de maneira tal que:

- No Capítulo 2, partiremos do Hamiltoniano para um elétron confinado em um anel quântico, estando esse Hamiltoniano escrito na forma completa. Considerando algumas aproximações, reduziremos o problema tridimensional a um unidimensional, chegando assim em uma nova forma para o Hamiltoniano, chamada agora de Hamiltoniano efetivo. Discutiremos sobre a escolha de um determinado potencial vetor, demonstrando a invariância das propriedades físicas do problema sobre a escolha do *gauge*. Obteremos as soluções tanto numérica quanto analítica para a caso sem qualquer potencial perturbativo externo, observando as oscilações Aharonov-Bohm.
- No Capítulo 3 estudaremos os efeitos de potenciais perturbativos, como o potencial gerado por uma aplicação de campo elétrico no plano do anel, juntamente ou não com um campo magnético perpendicular, sobre o espectro de energia. Ainda neste capítulo abordaremos o estudo da presença de uma ou mais impurezas positivas localizadas ao longo do anel, verificando seus efeitos sobre o espectro de energia, quando estas estão arrançadas de maneira simétrica, assimétrica e com uma certa aleatoriedade definida.
- No Capítulo 4, utilizaremos o método da matriz transferência para calcular os efeitos no espectro de energia de um elétron em um anel quântico ideal, devido a um potencial de confinamento adicional tipo superrede de poços quadrados ao longo da direção angular. Consideraremos os casos com apenas um poço quântico simples e também com vários poços com profundidades iguais ou aleatórias.
- No Capítulo 5 introduziremos as coordenadas relativas e do centro de massa para a solução do problema de um exciton no anel quântico, sob as aproximações já citadas. Em seguida, obteremos os espectros de energia para um anel rugoso, simulado por

um potencial aleatório ao longo da direção angular, e compararemos esses resultados com os autoestados do exciton em um anel sem rugosidade, e também com os do problema sob a influência adicional da presença de uma impureza com ou sem a aplicação de um campo magnético no plano do anel.

- Já no Capítulo 6, explanaremos as conclusões gerais acerca dos trabalhos apresentados nesta dissertação, apresentando também as perspectivas para a realização de futuros trabalhos envolvendo o mesmo sistema composto por um anel quântico sobre certas aproximações.

Capítulo 2

Anéis quânticos ideais

Neste capítulo estudaremos um sistema heteroestruturado de baixa dimensionalidade, o anel quântico, no qual consideramos algumas aproximações, com relação ao potencial de confinamento ser intenso e a respeito do tamanho da largura e da altura do anel, restringindo assim seu movimento à coordenada θ , como veremos na Seção 2.1.1. Ao título desse trabalho e desse capítulo atribuímos o adjetivo “ideal” justamente por causa das aproximações utilizadas nesse problema, transformando-o em um problema unidimensional. Veremos o porquê da escolha de um determinado potencial vetor, um *gauge*, para encontrar o Hamiltoniano efetivo do anel, mas também mostraremos que na verdade qualquer outro *gauge* poderia ser tomado sem alterar as propriedades físicas resultantes, isto é, mostraremos a invariância de *gauge*. Desta forma, na Seção 2.2 obtemos os autoestados de energia do anel sem influência de nenhuma fonte externa que gere algum potencial sobre o anel, e na Seção 2.3 abordamos a utilização de uma certa transformação de *gauge* para facilitar os cálculos quando implementarmos qualquer perturbação externa.

2.1 Modelo teórico

Nosso sistema consiste de um anel quântico com um elétron confinado no seu interior, na região $a \leq \rho \leq b$, cujo potencial tomamos como sendo igual a zero nessa região, área hachurada da Figura 31(a), e igual V_0 nas bordas interna e externa do anel, isto é, quando $\rho = a$ e $\rho = b$, e para as regiões $\rho < a$ e $\rho > b$, como mostra a Figura 32. O anel tem uma certa altura L_z .

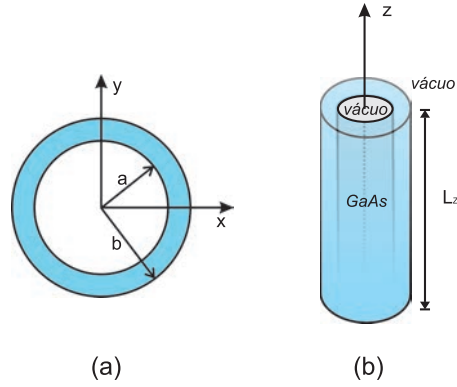


Figura 31: Representação de um anel quântico (a) bidimensional (plano xy) (b) tridimensional com altura L_z , formado por $GaAs$ na região do anel.

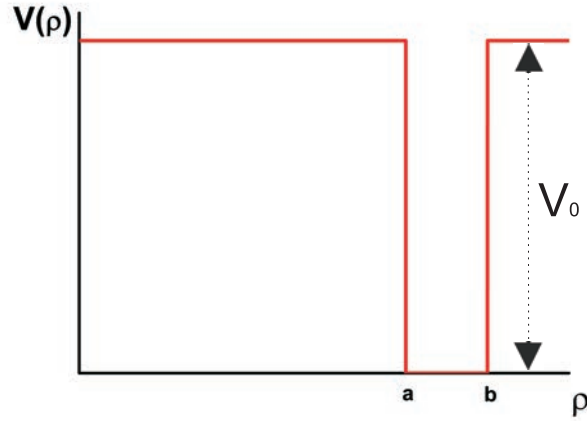


Figura 32: Representação esquemática do potencial do anel quântico na direção de ρ .

O potencial que define o confinamento devido ao anel quântico¹ é dado por

$$V_{QR}(\rho, \theta, z) = V_0 Y[-z] Y[z - L_z] Y[\rho - a] Y[b - \rho], \quad (2.1)$$

onde $Y[x]$, representada na Figura 33, é a função de *Heaviside* dada por:

$$Y[X] = \begin{cases} 1 & \text{se } x > 0 \\ 0 & \text{se } x < 0 \end{cases}. \quad (2.2)$$

Na presença de um campo magnético arbitrário $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$, temos que o Hamiltoniano para uma partícula [68] é dado por

$$H = \frac{1}{2m^*} [\vec{p} - q\vec{A}]^2 + U, \quad (2.3)$$

onde \vec{A} é o potencial vetor e U é um potencial qualquer. Como a partícula portadora no

¹O índice QR no potencial de confinamento é referente à expressão inglesa *Quantum Ring*.

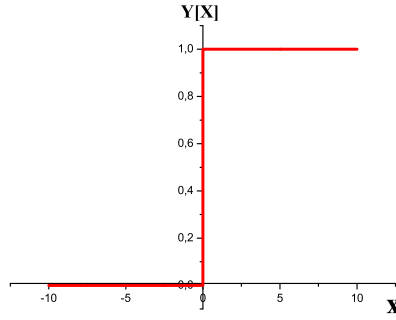


Figura 33: Representação esquemática da função de *Heaviside*, também chamada de função degrau. Ela é uma função descontínua de valor zero para argumento negativo, e 1 para argumento positivo.

problema é um elétron, sendo “ $-e$ ” sua carga, com $e > 0$, o Hamiltoniano torna-se

$$H = \frac{1}{2m^*}[-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A}]^2 + V_{QR}(\vec{r}) + V_{def}(\vec{r}), \quad (2.4)$$

onde o último termo, $V_{def}(\vec{r})$, representa uma perturbação devido a diferentes forças externas, e o termo $V_{QR}(\vec{r})$, como já foi dito, denota o confinamento na região do anel.

2.1.1 Algumas aproximações

Na grande maioria de modelos teóricos na Física, como em qualquer outra ciência, nos deparamos sempre com a necessidade de algumas aproximações para simplificar as descrições dos fenômenos. Tais aproximações não tornam o método menos importante, além de nos permitirem um entendimento melhor da física do problema, pois os modelos simplificados em geral aceitam soluções analíticas. Dessa maneira, faremos nesse trabalho algumas aproximações importantes que, como veremos, facilitarão as soluções dos nossos problemas:

1. O raio médio do anel é muito maior que sua largura radial e altura vertical, portanto:

$$R = \frac{a+b}{2} \gg (b-a), L_z; \quad (2.5)$$

2. O confinamento na região do anel é muito forte ($V_0 \rightarrow \infty$), isto é, as bordas interna e externa do anel podem ser descritas como barreiras de potencial infinito;
3. Utilizaremos a aproximação da massa efetiva, isto é, como se toda a estrutura formada por muitos átomos fosse considerada apenas como um sistema de um único

elétron, com uma massa diferente (ver Seção 1.4). Para todos os resultados desenvolvidos ao longo dos Capítulos 2, 3 e 4 e alguns do Capítulo 5, adotaremos a massa efetiva de elétrons de condução em $GaAs$, com valor dado por $m^* = 0.067m_e$, onde m_e é a massa do elétron livre. Já para os resultados de exciton no anel dados no Capítulo 5 utilizaremos o valor $m^* = 0.07m_e$ para compararmos com os resultados obtidos na referência [51].

Segundo essas considerações, temos que ambos os movimentos, radial e na direção de z , são “congelados”, de tal maneira que somos deixados apenas com o problema envolvendo a variável angular θ . Devido às aproximações, reduzimos o problema tridimensional em apenas uma estrutura ideal unidimensional, onde o movimento ocorre apenas ao longo da circunferência do anel. Essas aproximações definem o sistema que estudaremos como um anel quântico ideal.

2.1.2 A invariância na escolha do *gauge*

Começaremos nossa discussão considerando o movimento na direção z . Para isso, partiremos do Hamiltoniano dado pela Eq. (2.4) e o dividiremos em duas partes, uma contendo o movimento no plano e a outra relativa à coordenada z . Assim,

$$\begin{aligned}
 [-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A}]^2 &= \left[\left(-i\hbar\vec{\nabla}_{\parallel} + e\vec{A}_{\parallel} \right) + \left(-i\hbar\hat{z}\frac{\partial}{\partial z} + eA_z\hat{z} \right) \right]^2 \\
 &= \left[\left(-i\hbar\vec{\nabla}_{\parallel} + e\vec{A}_{\parallel} \right)^2 + \left(-i\hbar\vec{\nabla}_{\parallel} + e\vec{A}_{\parallel} \right) \left(\vec{P}_z + eA_z\hat{z} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \left(\vec{P}_z + eA_z\hat{z} \right) \left(-i\hbar\vec{\nabla}_{\parallel} + e\vec{A}_{\parallel} \right) + \left(\vec{P}_z + eA_z\hat{z} \right)^2 \right] \\
 &= \left[\left(-i\hbar\vec{\nabla}_{\parallel} + e\vec{A}_{\parallel} \right)^2 + P_z^2 + 2eA_zP_z + e^2A_z^2 \right], \tag{2.6}
 \end{aligned}$$

onde os dois termos mistos foram cancelados pelo fato de seus produtos escalares serem zero, e $\vec{P}_z = -i\hbar\hat{z}\frac{\partial}{\partial z}$ representa o momento na direção z . Temos também que $[A_z, P_z] = 0$, para garantir a uniformidade do campo magnético. Substituindo a Eq. (2.6) na Eq. (2.4) temos que

$$H = \frac{[-i\hbar\vec{\nabla}_{\parallel} + e\vec{A}_{\parallel}]^2}{2m^*} + \frac{P_z^2}{2m^*} + \frac{eA_zP_z}{m^*} + \frac{e^2A_z^2}{2m^*} + V_{QR}(\vec{r}) + V_{def}(\vec{r}). \tag{2.7}$$

Reescrevendo² $V_{QR}(\vec{r}) = V_{QR}(\vec{r}_{||}) + V_{QW}(z)$, obtemos³

$$H = H_{||} + H_z, \quad (2.8)$$

sendo

$$H_{||} = \frac{[-i\hbar\vec{\nabla}_{||} + e\vec{A}_{||}]^2}{2m^*} + \frac{(eA_z)^2}{2m^*} + V_{QR}(\vec{r}_{||}) + V_{def}(\vec{r}) \quad (2.9)$$

e

$$H_z = \frac{P_z^2}{2m^*} + \frac{eA_z P_z}{m^*} + V_{QW}(z). \quad (2.10)$$

Se fizermos $A_z = 0$ na Eq. (2.10), o Hamiltoniano em z terá como autofunções as soluções usuais para poços quânticos, dadas por:

$$\psi(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{n\pi z}{L_z}\right), \quad (2.11)$$

com as respectivas autoenergias dadas por:

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m^* L_z^2}, \quad (2.12)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$. Assim, trataremos o problema na coordenada z por Teoria da Perturbação não-degenerada [14, 15, 55, 69], já que são conhecidas as soluções para parte não perturbada do Hamiltoniano

$$H_0 = \frac{P_z^2}{2m^*} + V_{QW}(z), \quad (2.13)$$

sendo $H_z = H_0 + \frac{eA_z P_z}{m^*}$. Consideraremos o termo proporcional a P_z como uma perturbação, isto é,

$$H_z(\lambda) = H_0 + \lambda \hat{W}, \quad \text{onde} \quad \hat{W} = \frac{eA_z}{m^*} P_z. \quad (2.14)$$

Considerando correções de segunda ordem nas energias, temos pela Teoria da Perturbação que

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \psi_n | \hat{W} | \psi_n \rangle + \sum_{i \neq n} \frac{|\langle \psi_n | \hat{W} | \psi_i \rangle|^2}{E_n^0 - E_i^0} + \mathcal{O}(\lambda^3), \quad (2.15)$$

onde a função de onda e a energia utilizadas são as não perturbadas, dadas pelas Eqs. (2.11) e (2.12), respectivamente. Calculando o termo de primeira ordem vemos que esse

²O índice QW denota *Quantum Well*.

³Note que isso só pode ser feito porque o potencial externo é infinito.

termo não afeta a solução:

$$\begin{aligned}
\langle \psi_n | \hat{W} | \psi_n \rangle &= \frac{eA_z}{m^*} \langle \psi_n | P_z | \psi_n \rangle \\
&= -\frac{eA_z i \hbar}{m^* L_z} \left\langle \sin \left(\frac{n\pi z}{L_z} \right) \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| \sin \left(\frac{n\pi z}{L_z} \right) \right\rangle \\
&= -\frac{2ieA_z \hbar}{m^* L_z} \int_0^{L_z} \sin \left(\frac{n\pi z}{L_z} \right) \frac{\partial}{\partial z} \left(\sin \left(\frac{n\pi z}{L_z} \right) \right) dz \\
&= -\frac{2n\pi i e A_z \hbar}{m^* L_z^2} \int_0^{L_z} \sin \left(\frac{n\pi z}{L_z} \right) \cos \left(\frac{n\pi z}{L_z} \right) dz.
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Como

$$\sin(a) \cos(b) = \frac{1}{2} [\sin(a+b) + \sin(a-b)], \tag{2.17}$$

então

$$\begin{aligned}
\int_0^{L_z} \sin \left(\frac{n\pi z}{L_z} \right) \cos \left(\frac{n\pi z}{L_z} \right) dz &= \frac{1}{2} \int_0^{L_z} \sin \left(\frac{2n\pi z}{L_z} \right) dz \\
&= \frac{L_z}{4n\pi} [1 - \cos(2n\pi)] \\
&= 0, \quad \forall n \in \mathbb{Z}.
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Substituindo este resultado na Eq. (2.16) temos que:

$$\langle \psi_n | \hat{W} | \psi_n \rangle = 0, \quad \forall n \in \mathbb{Z}. \tag{2.19}$$

Para correções de segunda ordem na energia do estado fundamental, fazendo $i = 1$ na Eq. (2.15), temos então que

$$\begin{aligned}
E_1(\lambda) &= E_1^0 - \sum_{n=2,3,4,\dots} \frac{|\langle \psi_1 | \hat{W} | \psi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_1^0} + \mathcal{O}(\lambda^3) \\
&= E_1^0 - \left(\frac{eA_z}{m^*} \right)^2 \sum_{n=2,3,4,\dots} \frac{\langle \psi_1 | P_z | \psi_n \rangle \langle \psi_n | P_z | \psi_1 \rangle}{E_n^0 - E_1^0} + \mathcal{O}(\lambda^3).
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Calculando os termos do somatório partimos de

$$\begin{aligned}
\langle \psi_1 | P_z | \psi_n \rangle &= -\frac{2i\hbar}{L_z} \left\langle \sin \left(\frac{\pi z}{L_z} \right) \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| \sin \left(\frac{n\pi z}{L_z} \right) \right\rangle \\
&= -\frac{2i\hbar}{L_z} \int_0^{L_z} \sin \left(\frac{\pi z}{L_z} \right) \frac{\partial}{\partial z} \left(\sin \left(\frac{n\pi z}{L_z} \right) \right) dz \\
&= -\frac{2n\pi i \hbar}{L_z^2} \int_0^{L_z} \sin \left(\frac{\pi z}{L_z} \right) \cos \left(\frac{n\pi z}{L_z} \right) dz.
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Utilizando a Eq. (2.17), temos

$$\begin{aligned}
\int_0^{L_z} \sin\left(\frac{\pi z}{L_z}\right) \cos\left(\frac{n\pi z}{L_z}\right) dz &= \frac{1}{2} \left[\int_0^{L_z} \sin\left(\frac{(n+1)\pi z}{L_z}\right) dz + \int_0^{L_z} \sin\left(\frac{(1-n)\pi z}{L_z}\right) dz \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[-\frac{L_z}{(n+1)\pi} [\cos((n+1)\pi) - 1] \right. \\
&\quad \left. - \frac{L_z}{(1-n)\pi} [\cos((1-n)\pi) - 1] \right] \\
&= \frac{L_z}{2\pi} \left[\frac{2}{(n+1)} + \frac{2}{(1-n)} \right] \\
&= \frac{L_z}{\pi} \left[\frac{n-1-n-1}{(n^2-1)} \right] \\
&= -\frac{2L_z}{(n^2-1)\pi}, \tag{2.22}
\end{aligned}$$

onde n é par e maior ou igual a 2. Substituindo este resultado na Eq. (2.21) temos

$$\langle \psi_1 | \hat{P}_z | \psi_n \rangle = \frac{4ni\hbar}{(n^2-1)L_z}. \tag{2.23}$$

Calculando agora seu complexo conjugado, $\langle \psi_1 | \hat{P}_z | \psi_n \rangle^* = \langle \psi_n | \hat{P}_z | \psi_1 \rangle$, prosseguindo de maneira análoga, temos

$$\langle \psi_n | P_z | \psi_1 \rangle = -\frac{2n\pi i\hbar}{L_z^2} \int_0^{L_z} \sin\left(\frac{n\pi z}{L_z}\right) \cos\left(\frac{\pi z}{L_z}\right) dz, \tag{2.24}$$

e como

$$\begin{aligned}
\int_0^{L_z} \sin\left(\frac{n\pi z}{L_z}\right) \cos\left(\frac{\pi z}{L_z}\right) dz &= \frac{1}{2} \left[\int_0^{L_z} \sin\left(\frac{(n+1)\pi z}{L_z}\right) dz + \int_0^{L_z} \sin\left(\frac{(n-1)\pi z}{L_z}\right) dz \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[-\frac{L_z}{(n+1)\pi} [\cos((n+1)\pi) - 1] \right. \\
&\quad \left. - \frac{L_z}{(n-1)\pi} [\cos((n-1)\pi) - 1] \right] \\
&= \frac{L_z}{2\pi} \left[\frac{2}{(n+1)} + \frac{2}{(n-1)} \right] \\
&= \frac{L_z}{\pi} \left[\frac{n-1+n+1}{(n^2-1)} \right] \\
&= \frac{2nL_z}{(n^2-1)\pi}, \tag{2.25}
\end{aligned}$$

onde n é par e maior ou igual a 2 obtemos finalmente

$$\langle \psi_n | \hat{P}_z | \psi_1 \rangle = -\frac{4ni\hbar}{(n^2-1)L_z}, \tag{2.26}$$

como já esperado, pois esse termo é o complexo conjugado da Eq. (2.23). Pela Eq. (2.12),

temos que:

$$E_n^0 - E_1^0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L_z^2} (n^2 - 1). \quad (2.27)$$

Substituindo as Eqs. (2.23), (2.26) e (2.27) na Eq. (2.20) obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{n=2,3,4,\dots} \frac{|\langle \psi_1 | \hat{W} | \psi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_1^0} &= \sum_{n=2,4,6,\dots} \frac{\left(-\frac{4m_i \hbar}{(n^2-1)L_z} \right) \left(\frac{4m_i \hbar}{(n^2-1)L_z} \right)}{\left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L_z^2} (n^2 - 1) \right)} \\ &= \frac{32m^*}{\pi^2} \sum_{n=2,4,6,\dots} \frac{n^2}{(n^2 - 1)^3}, \end{aligned} \quad (2.28)$$

e então,

$$E_1(\lambda) = E_1^0 - \frac{32e^2 A_z^2}{m^* \pi^2} \sum_{n=2,4,6,\dots} \frac{n^2}{(n^2 - 1)^3} + \mathcal{O}(\lambda^3). \quad (2.29)$$

Somando a série, temos em primeira ordem o valor aproximado

$$\sum_{n=2,4,6,\dots} \frac{n^2}{(n^2 - 1)^3} = \sum_{k=1,2,3,\dots} \frac{(2k)^2}{((2k)^2 - 1)^3} = \frac{\pi^2}{64}, \quad (2.30)$$

assim

$$E_1(\lambda) = E_1^0 - \frac{(eA_z)^2}{2m^*} + \mathcal{O}(\lambda^3). \quad (2.31)$$

De maneira análoga, poderíamos ter considerado um confinamento parabólico para $V_{QW}(z)$, o que resultaria na mesma energia. Podemos ver neste resultado que o termo $-\frac{(eA_z)^2}{2m^*}$ compensa exatamente o termo dependente de A_z no Hamiltoniano paralelo, $H_{||}$, cancelando-o e retirando completamente a dependência na forma do potencial vetor na direção z . Vemos que, diferentemente da afirmação feita por J.Planelles *et al.* [42], campos inclinados com relação ao plano do anel não interferem fisicamente no problema. Mesmo em uma abordagem clássica, o elétron confinado no plano, isto é, em um sistema 2D, não pode ser defletido por um campo magnético no plano já que a força de Lorentz é sempre ineficiente neste caso: o sistema não tem espessura, por apresentar um confinamento infinito de um poço quântico em z , isto é, o elétron não possui uma região classicamente permitida fora do plano do anel para executar qualquer trajetória, como deveria se esperar, que fizesse um movimento espiral quando acoplado com o campo magnético devido à força de Lorentz [59, 60]. Demonstramos matematicamente, utilizando Teoria da Perturbação, que a componente no plano desse possível campo magnético inclinado, que se manifestaria como $A_z \neq 0$, não aparece na equação do Hamiltoniano sendo portanto o potencial vetor dependente somente das coordenadas do plano do anel. Uma maneira de evitar esse problema na definição do potencial vetor é escolher $A_z = 0$, mas vemos que não

é necessário, uma vez que mostramos que H é independente de A_z e que a única restrição sobre o potencial vetor é que $\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}$. Portanto, esse fato assegura a invariância de *gauge* quando nos restringimos a um sistema 2D.

Em nosso problema, como o campo magnético está na direção z temos que

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = B\hat{z}, \quad (2.32)$$

e escrevendo o potencial vetor em coordenadas cartesianas

$$\vec{A} = A_x\hat{x} + A_y\hat{y} + A_z\hat{z}, \quad (2.33)$$

obtemos

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = (A_{z,y} - A_{y,z})\hat{x} + (A_{x,z} - A_{z,x})\hat{y} + (A_{y,x} - A_{x,y})\hat{z}, \quad (2.34)$$

onde utilizamos a notação

$$\frac{\partial A_i}{\partial j} = A_{i,j}. \quad (2.35)$$

Logo, pela Eq. (2.32) vemos que:

$$\begin{cases} A_{z,y} = A_{y,z} \\ A_{x,z} = A_{z,x} \\ A_{y,x} - A_{x,y} = B_z. \end{cases} \quad (2.36)$$

Podemos observar, da Eq. (2.36), que existem duas quantidades que podem ainda ser escolhidas de diferentes maneiras. Em particular temos as seguintes escolhas:

$$\begin{aligned} A_{y,x} = -A_{x,y} = \frac{B_z}{2} & \quad (\text{Gauge simétrico}) \\ A_{y,x} = 0 \quad e \quad A_{x,y} = -B_z & \quad (\text{Gauge de Landau}) \end{aligned} \quad (2.37)$$

Escolheremos, por ser mais apropriado ao nosso sistema, o *gauge* simétrico, como veremos na próxima subseção, já que o Hamiltoniano efetivo a ser resolvido tem apenas componentes na direção $\hat{\theta}$, a mesma direção do *gauge* escolhido.

2.1.3 O Hamiltoniano efetivo do anel quântico ideal

Em nosso trabalho fizemos a escolha do *gauge* simétrico, dado por

$$\vec{A} = A_\theta\hat{\theta} = \frac{1}{2}B\rho\hat{\theta}, \quad (2.38)$$

para o campo magnético na direção do eixo z , $\vec{B} = B_z \hat{z}$, perpendicular ao plano do anel. Indiferentemente da escolha tomada, qualquer valor poderia ser escolhido para o potencial vetor desde que satisfaça a condição citada acima para o problema. Podemos fazer isto, pois a função de onda Ψ pode ser definida pelo produto de uma nova função Ψ' e uma fase, tal que as funções Ψ e Ψ' representam o mesmo estado físico diferindo apenas de um fator de fase. Dessa forma, para potenciais vetores distintos a única diferença entre as funções de onda que descrevem o problema se encontrará na fase da função de onda, não afetando o espectro de energia do sistema. Qualquer teoria que satisfaz o fato do potencial vetor \vec{A} não ser unicamente definido é dita ser invariante de *gauge*, também chamada de invariância de calibre [55]. Isto significa que ao se definir um novo potencial vetor $\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda$, onde Λ é uma função real arbitrária da posição e do tempo, encontra-se o mesmo campo. Esta é a transformação de *gauge*.

Substituindo essa forma do *gauge* no Hamiltoniano, Eq. (2.4), e escolhendo coordenadas cilíndricas, temos primeiramente que

$$\begin{aligned}
H &= \frac{(-i\hbar\vec{\nabla})^2}{2m^*} + \frac{e}{m^*}\vec{p}\cdot\vec{A} + \frac{e^2 A^2}{2m^*} + V_{QR}(\rho, \theta, z) + V_{def}(\rho, \theta, z) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{ie\hbar}{m^*}\left[\frac{\partial}{\partial\rho}\hat{\rho} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\theta}\hat{\theta} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{z}\right]\frac{1}{2}B\rho\hat{\theta} \\
&\quad + \frac{e^2}{8m^*}B^2\rho^2 + V_{QR}(\rho, \theta, z) + V_{def}(\rho, \theta, z) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{ie\hbar B}{2m^*}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{e^2}{8m^*}B^2\rho^2 + V_{QR}(\rho, \theta, z) + V_{def}(\rho, \theta, z), \quad (2.39)
\end{aligned}$$

e após substituir $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$, que é chamada de frequência de ciclotron, na Eq. (2.39), obtemos

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{i\hbar\omega_c}{2}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{m^*\omega_c^2}{8}\rho^2 + V_{QR}(\rho, \theta, z) + V_{def}(\rho, \theta, z). \quad (2.40)$$

Considerando as aproximações feitas na Seção 2.1.1, que tornam o problema unidimensional, com o elétron confinado apenas na direção θ , teremos que: (i) os operadores momento em z e ρ têm valor médio zero, sendo assim eliminados do Hamiltoniano; (ii) as derivadas parciais em θ no Hamiltoniano se tornarão derivadas totais; (iii) o anel terá um raio fixo R e uma posição fixa $z = 0$, pois assumimos o caso limite em que a largura do anel é muito fina, isto é, $b - a \rightarrow 0$. Portanto, finalmente obtemos o Hamiltoniano efetivo, sendo dado por

$$H_{eff} = -\frac{\hbar^2}{2m^*R^2}\frac{d^2}{d\theta^2} - \frac{i\hbar\omega_c}{2}\frac{d}{d\theta} + \frac{m^*\omega_c^2}{8}R^2 + V_{def}(R, \theta, 0). \quad (2.41)$$

Reescrevendo o Hamiltoniano (2.41), sabendo-se que $\lambda_c = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ é o raio de ciclotron, também chamado de comprimento magnético, obtemos

$$H_{eff} = \frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \left\{ -i\frac{d}{d\theta} + \frac{1}{2} \left(\frac{R}{\lambda_c} \right)^2 \right\}^2 + V_{def}(R, \theta, 0). \quad (2.42)$$

Três pontos importantes a respeito do Hamiltoniano, dado pela Eq. (2.42), podem ser verificados:

- O termo $\frac{1}{2} \left(\frac{R}{\lambda_c} \right)^2$ está relacionado com o fluxo magnético

$$\frac{1}{2} \left(\frac{R}{\lambda_c} \right)^2 = \frac{\pi R^2 B}{h/e} \equiv \frac{\phi}{\phi_0}, \quad (2.43)$$

onde ϕ é o fluxo magnético através da superfície do anel quântico, e $\phi_0 = h/e$ é o fluxo elementar.

- Qualquer potencial perturbativo tem periodicidade angular:

$$V_{def}(R, \theta + 2\pi, 0) = V_{def}(R, \theta, 0). \quad (2.44)$$

- Como reduzimos o problema a uma só variável, a angular, então a função de onda também só dependerá da coordenada θ , isto é, $\Psi = \Psi(\theta)$. A função de onda tem periodicidade angular, dada pela condição $\Psi(\theta) = \Psi(\theta + 2\pi)$.

Temos então que a equação de Schrödinger para o sistema em questão é dada por

$$H_{eff}\Psi(\theta) = E\Psi(\theta), \quad (2.45)$$

ou ainda,

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \left(-i\frac{d}{d\theta} + \frac{\phi}{\phi_0} \right)^2 + V_{def}(R, \theta, 0) \right\} \Psi(\theta) = E\Psi(\theta). \quad (2.46)$$

2.2 Solução de um anel quântico ideal na ausência de perturbação

Iremos aqui desprezar qualquer influência de forças externas, de tal maneira que no Hamiltoniano esteja presente apenas o campo magnético. Logo, fazemos $V_{def}(R, \theta, 0) = 0$

na Eq. (2.42), tendo portanto, de acordo com a equação de Schrödinger (2.46)

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \left[-i\frac{d}{d\theta} + \frac{\phi}{\phi_0} \right]^2 \right\} \Psi(\theta) = E\Psi(\theta). \quad (2.47)$$

Como temos uma equação diferencial ordinária de segunda ordem com coeficientes constantes e homogêneas, tomaremos a solução da forma:

$$\Psi(\theta) = ke^{\alpha\theta}. \quad (2.48)$$

Assim, substituindo na Eq. (2.47), temos a seguinte equação para α :

$$\frac{\hbar^2}{2m^*R^2}\alpha^2 + \frac{i\hbar\omega_c}{2}\alpha - \frac{m^*\omega_c^2R^2}{8} + E = 0, \quad (2.49)$$

sendo as raízes α dessa equação dadas por:

$$\alpha = \frac{im^*R^2}{\hbar^2} \left[-\frac{\hbar\omega_c}{2} \pm \left(\frac{2\hbar^2E}{m^*R^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] = in. \quad (2.50)$$

Daí, isolando E :

$$E = \frac{m^*R^2}{2\hbar^2} \left(\frac{n\hbar^2}{m^*R^2} + \frac{\hbar\omega_c}{2} \right)^2, \quad (2.51)$$

e substituindo ω_c e a razão ϕ/ϕ_0 dos fluxos magnético e elementar, obtemos que

$$n = -\frac{\phi}{\phi_0} \pm \sqrt{\frac{2m^*R^2E}{\hbar^2}}. \quad (2.52)$$

Finalmente, temos que as autoenergias para um anel quântico unidimensional na ausência de perturbação são dadas por

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \left\{ n + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2. \quad (2.53)$$

Normalizando a função de onda, $\Psi(\theta) = ke^{in\theta}$ temos que

$$\int_0^{2\pi} \Psi(\theta)\Psi^*(\theta)d\theta = 1, \quad (2.54)$$

e substituindo Ψ :

$$k^2 \int_0^{2\pi} e^{in\theta} e^{-in\theta} d\theta = 1, \quad (2.55)$$

daí

$$k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \quad (2.56)$$

logo a função de onda normalizada é:

$$\Psi(\theta) = \frac{e^{in\theta}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (2.57)$$

Como $\Psi(\theta)$ tem periodicidade angular, então deve ser uma função cíclica ao longo da circunferência. Logo, substituindo a forma da função de onda dada pela Eq. (2.48) podemos obter os valores possíveis para n :

$$\Psi(\theta) = \Psi(\theta + 2\pi) \rightarrow ke^{in\theta} = ke^{in(\theta+2\pi)} \rightarrow e^{in2\pi} = 1, \quad (2.58)$$

daí

$$\cos(2n\pi) + i \sin(2n\pi) = 1. \quad (2.59)$$

e igualando os termos reais e imaginários, por comparação, temos que:

$$\cos(2n\pi) = 1 \quad \text{e} \quad \sin(2n\pi) = 0, \quad (2.60)$$

obtendo $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, ou seja, n é um número inteiro. Desse modo, como tanto as autofunções e as autoenergias dependem de n , então só podem assumir certos valores devido a essa periodicidade da função de onda. Vemos que n representa o momento quântico angular. Resumindo, temos que as Eqs. (2.53) e (2.57) são respectivamente as autoenergias e as autofunções para o problema do anel quântico ideal sem a presença de qualquer potencial perturbativo, com apenas alguns valores permitidos para o número quântico n .

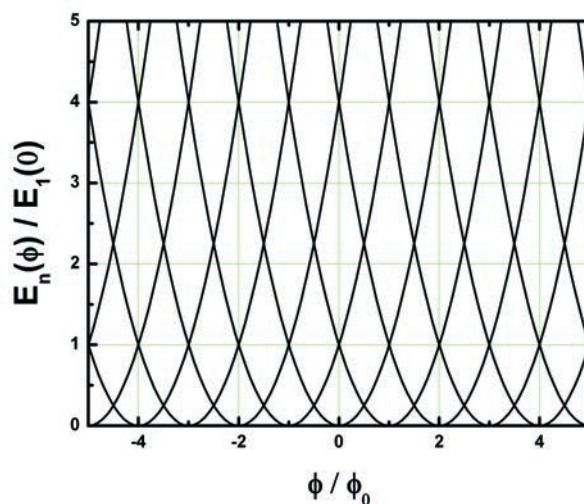


Figura 34: Espectro de energia sob a influência do fluxo magnético, verificando o efeito Aharonov-Bohm.

Vemos que para n fixo a autoenergia é uma função quadrática do campo, de modo

que para cada valor de n teremos uma parábola com a variação do campo magnético. Na Figura 34 mostramos esse resultado analítico da dependência do espectro de energia com a variação do campo magnético, o qual está expresso adimensionalmente, em termos da razão do fluxo magnético pelo fluxo elementar.

Esse resultado bem conhecido é chamado de oscilações Aharonov-Bohm, que consistem em oscilações periódicas do espectro de energia à medida que o campo magnético aumenta, devido a transições de momento angular. Podemos visualizar tal comportamento na Figura 34, em que, por exemplo, o primeiro estado de energia é composto pelas sucessivas partes das parábolas com valores de energias mais baixos, com cada parte formada pelos valores entre os dois pontos degenerados, em que cada parábola é respectivamente associada a um valor de n . Dessa maneira, ao variarmos a intensidade do campo magnético, vemos que o determinado nível de energia troca de momento angular n em cada ponto degenerado de cruzamento de duas parábolas sucessivas.

2.3 Perturbação: Algumas considerações

Na presença de qualquer potencial perturbativo devemos resolver o Hamiltoniano efetivo dado pela Eq. (2.42) sem desprezar nenhum de seus termos. Diferentes tipos de perturbações podem ser considerados, como por exemplo as abordadas em nosso trabalho: as influências de campo elétrico, a presença de impurezas e de superredes de poços de potenciais ao longo da direção angular. Vamos discutir aqui aspectos gerais importantes do problema de autovalor perturbado, Eq. (2.45), sendo o Hamiltoniano dado por

$$H_{eff} = \frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \left\{ -i\frac{d}{d\theta} + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 + V_{def}(R, \theta, 0), \quad (2.61)$$

utilizando uma transformação de *gauge* que, como veremos, facilitará a resolução nos casos em que o anel recebe influência de algum agente externo.

2.3.1 Transformação de *gauge*

Vemos claramente, ao expandirmos o termo quadrático da Eq. (2.61), que o Hamiltoniano tem um termo imaginário proporcional a $\phi\partial/\partial\theta$. Como sabemos, não é muito conveniente trabalhar com termos imaginários, principalmente em propósitos numéricos, como está escrito na forma do Hamiltoniano da Eq. (2.42). Tendo em vista esse fato,

realizaremos a seguinte transformação para eliminar esse termo:

$$\Psi(\theta) = \Phi(\theta)e^{\left\{-i\frac{\phi}{\phi_0}\theta\right\}}, \quad (2.62)$$

sendo essa transformação chamada de transformação de *gauge* ou transformação de Ca-libre. Aplicando na Eq. (2.45), facilmente chegamos à forma:

$$\left\{\frac{-\hbar^2}{2m^*R^2}\frac{d^2}{d\theta^2} + V_{def}(R, \theta, 0)\right\}\Phi(\theta) = E\Phi(\theta). \quad (2.63)$$

Nessa nova abordagem do problema o Hamiltoniano não apresenta uma dependência explícita do campo magnético. Porém, o mesmo deve ser resolvido com a aplicação de novas condições de contorno periódicas, obtidas através da aplicação da transformação de *gauge* nas antigas condições de contorno devido à periodicidade da função de onda e de sua derivada, como faremos a seguir:

- Para a condição de periodicidade da função de onda:

Como já comentado na Seção 2.1.3, a condição de periodicidade para a função de onda $\Psi(\theta)$ é dado por:

$$\Psi(\theta) = \Psi(\theta + 2\pi). \quad (2.64)$$

Para encontramos essa condição no caso da função de onda $\Phi(\theta)$, solução do Hamiltoniano (2.63), substituiremos a transformação dada pela Eq. (2.62) na Eq. (2.64):

$$\begin{aligned} \Psi(\theta) &= \Phi(\theta)e^{\left\{-i\frac{\phi}{\phi_0}\theta\right\}} \\ \Psi(\theta + 2\pi) &= \Phi(\theta + 2\pi)e^{\left\{-i\frac{\phi}{\phi_0}\theta\right\}}e^{\left\{-i\frac{\phi}{\phi_0}2\pi\right\}}, \end{aligned} \quad (2.65)$$

obtendo assim a nova condição de periodicidade da função, dada por:

$$\Phi(\theta + 2\pi) = \Phi(\theta)e^{\left\{i2\pi\frac{\phi}{\phi_0}\right\}}. \quad (2.66)$$

É válido ressaltar que essa nova condição tem que estar em concordância com, e de fato obedece, a solução do Hamiltoniano não transformado, equação de autovalor para Ψ , obtendo o efeito Aharonov-Bohm.

Seja $T_{2\pi}$ o operador de translação de 2π , com a propriedade:

$$T_{2\pi}\Phi(\theta) = \Phi(\theta + 2\pi) = e^{\left\{i2\pi\frac{\phi}{\phi_0}\right\}}\Phi(\theta), \quad (2.67)$$

isto significa que $\Phi(\theta)$ é autofunção do operador $T_{2\pi}$ com autovalor $\exp\left\{i2\pi\frac{\phi}{\phi_0}\right\}$.

- Para a condição de continuidade da função de onda:

Como sabemos, a derivada primeira da função de onda tem que ser contínua. Tendo em vista essa propriedade, obtemos agora a condição de periodicidade da derivada da função $\Phi(\theta)$ devido à transformação de *gauge*, no qual temos que:

$$\left. \frac{d}{d\theta} \Psi(\theta) \right|_{\theta+2\pi} = \left. \frac{d}{d\theta} \Psi(\theta) \right|_{\theta}, \quad (2.68)$$

e utilizando a transformação, Eq. (2.62), obtemos finalmente a nova condição de periodicidade da derivada

$$\left. \frac{d}{d\theta} \Phi(\theta) \right|_{\theta+2\pi} = \left. \frac{d}{d\theta} \Phi(\theta) \right|_{\theta} e^{\{i2\pi \frac{\phi}{\phi_0}\}}. \quad (2.69)$$

Essa condição veio, como já comentamos, da continuidade da derivada da função de onda total $\Psi(\theta)$. Aqui assumimos que o potencial perturbativo é contínuo e tem derivada contínua.

À título de validação da transformação utilizada, adotaremos o problema da ausência de perturbação, de acordo com a Eq. (2.63), fazendo $V_{def} = 0$, e compararemos os resultados aqui obtidos com os das Eqs. (2.57) e (2.53). Nesse caso, temos que as soluções são:

- Para as autofunções:

$$\Phi(\theta) = \Phi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\{i(n + \frac{\phi}{\phi_0})\theta\}}, \quad (2.70)$$

- Para as autoenergias:

$$E_n = E_n(B) = \frac{\hbar^2}{2m^* R^2} \left\{ n + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2, \quad (2.71)$$

as quais são de fato as mesmas soluções discutidas anteriormente, pois como $\Psi(\theta) = \frac{e^{in\theta}}{\sqrt{2\pi}}$ e $\Psi(\theta) = \Phi(\theta)e^{-i\frac{\phi}{\phi_0}\theta}$, obtemos por substituição realmente a relação (2.70), e o espectro de energia é o mesmo, pois descreve o mesmo sistema físico.

Uma observação bastante relevante, decorrente das Eqs. (2.62), (2.66) e (2.69), sobre a vantagem de trabalhar com o problema de autovalor para $\Phi(\theta)$, é que o Hamiltoniano não mais contém termos imaginários. Entretanto, temos que lidar agora com condições de contorno periódicas que trazem toda a dependência do campo magnético, sendo elas complexas. Isto se torna claro ao separarmos a função de onda na sua parte real e

imaginária,

$$\Phi(\theta) = \Phi_R(\theta) + i\Phi_I(\theta), \quad (2.72)$$

de tal forma que a equação diferencial a ser resolvida possuirá duas partes, assim como a condição de contorno periódica da função:

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^* R^2} \frac{d^2}{d\theta^2} + V_{def}(R, \theta, 0) \right\} \Phi_{(R)}(\theta) = E \Phi_{(R)}(\theta) \quad (2.73)$$

$$\Phi(\theta + 2\pi) = \Phi(\theta) e^{\left\{ i2\pi \frac{\phi}{\phi_0} \right\}}. \quad (2.74)$$

Definindo $\delta_\phi = 2\pi \frac{\phi}{\phi_0}$, temos que a condição de periodicidade da função de onda torna-se:

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} \Phi_R(\theta + 2\pi) \\ \Phi_I(\theta + 2\pi) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\delta_\phi) & -\sin(\delta_\phi) \\ \sin(\delta_\phi) & \cos(\delta_\phi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_R(\theta) \\ \Phi_I(\theta) \end{bmatrix}. \quad (2.75)$$

Assim $\Phi_R(\theta)$ e $\Phi_I(\theta)$ são soluções do mesmo Hamiltoniano com as mesmas energias, mas obedecem a condições de fronteira acopladas e complexas.

O uso da transformação de *gauge* permite-nos obter uma propriedade muito importante do espectro de energia, que inclui ambos os casos, anel ideal com e sem perturbação, que diz que: ***o espectro de energia para um anel quântico ideal, unidimensional, é uma função periódica de $\frac{\phi}{\phi_0}$.***

Isto é claramente visível nas fórmulas anteriores, que são todas funções periódicas do parâmetro $\delta_\phi = 2\pi \frac{\phi}{\phi_0}$, que de fato é o autovalor do operador translação $T_{2\pi}$ e é a fase da função de onda, como visto na Eq. (2.62). Entretanto, o espectro de energia para um anel quântico ideal apresenta em adição uma forte e peculiar característica: os autoestados são duplamente degenerados para números meio-inteiros do fluxo magnético pelo fluxo elementar, isto é:

$$E_n = E_{-(n+2p+1)} \quad \text{se} \quad \frac{\phi}{\phi_0} = p + \frac{1}{2} \quad (2.76)$$

onde n e p podem assumir os valores $0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

Essa degenerescência é a origem do conhecido efeito Aharonov-Bohm, ver Seção 1.8, que são oscilações do espectro de energia com função do campo magnético, ver Figura 34. Da relação (2.76), vemos que se fixarmos n (o que se refere a um único estado), teremos um valor de energia E_n que será o mesmo para o estado $-(n + 2p + 1)$. Temos ainda que se variarmos p , obteremos todos os estados degenerados ao estado fixado a priori.

Em particular, os dois primeiros estados degenerados em $\phi/\phi_0 = p + 1/2$ diferem por uma unidade do momento angular. Em geral, para todos os estados degenerados para um mesmo valor de energia, onde teremos dois estados degenerados por vez, vemos que duas combinações desses estados degenerados estão separadas por uma unidade do momento angular.

A consequência dessa periodicidade com respeito à ϕ/ϕ_0 é que nós podemos nos limitar apenas ao estudo das soluções no intervalo $-1 < \phi/\phi_0 < +1$.

2.4 Método numérico

Em vários problemas físicos onde a solução analítica é inviável, no sentido de ter muitas restrições, é conveniente recorrer a soluções baseadas em métodos numéricos. Neste trabalho utilizamos uma técnica numérica de diferenças finitas para resolver as equações diferenciais que se encontram ao longo desta dissertação.

Aplicamos aqui uma técnica para encontrar as soluções da equação de Schrödinger unidimensional de uma partícula submetida a um potencial U dentro da aproximação de massa efetiva, onde a massa efetiva é tomada como função da variável espacial, isto é, $m(x) = \mu(x)m_e$ para o caso unidimensional, sendo m_e a massa de repouso do elétron. Estenderemos a técnica para solucionar a equação de Schrödinger bidimensional no Capítulo 5. Para isso, vamos discretizar a equação diferencial em um *grid* no espaço, isto é, escrevemos a equação de Schrödinger em passos discretos, h , assumindo as formas da derivada primeira e derivada segunda discretizadas. Dessa maneira, encontramos o Hamiltoniano do sistema em uma forma matricial bastante simples, com formato tridiagonal para um sistema unidimensional, e pentadiagonal em blocos para o caso bidimensional. Encontraremos os autovalores e autovetores do problema diagonalizando a matriz do Hamiltoniano.

Como veremos, as soluções obtidas a partir desta técnica são bastante flexíveis, no sentido que nos permitem estudar problemas submetidos a diferentes potenciais e com funções arbitrárias que descrevem a massa efetiva.

2.4.1 Técnica de discretização: solução unidimensional

Seja a equação de Schrödinger para um potencial de confinamento unidimensional na aproximação de massa efetiva dada por

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\mu(x)} \frac{d}{dx} \right) + U(x) \right\} \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (2.77)$$

Usaremos os conhecidos valores das constantes de Rydberg, R_y , e raio de Bohr, r_0 , para adimensionalizar a equação de Schrödinger, e assim não nos preocuparmos com as unidades na construção de um programa com a utilização da técnica [19, 63]:

$$R_y = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}, \quad (2.78)$$

e

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}. \quad (2.79)$$

Dividindo a Eq. (2.78) pela Eq. (2.77) e utilizando a relação (2.79), temos que

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{R_y} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\mu(x)} \frac{d\Psi(x)}{dx} \right) + \frac{U(x)}{R_y} \Psi(x) &= \frac{E}{R_y} \Psi(x) \\ -r_0^2 \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\mu(x)} \frac{d\Psi(x)}{dx} \right) + U'(x) \Psi(x) &= E' \Psi(x), \end{aligned} \quad (2.80)$$

ao considerarmos as seguintes transformações $U'(x) = \frac{U(x)}{R_y}$ e $E' = \frac{E}{R_y}$. Agora fazendo $x' = \frac{x}{r_0}$, temos que

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \Psi(r_0 x') = \Psi'(x') \\ U'(x) &= U'(r_0 x') = U''(x') \\ \mu(x) &= \mu(r_0 x') = \mu'(x'), \end{aligned} \quad (2.81)$$

e como $dx'/dx = 1/r_0$, logo

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = \frac{d\Psi'(x')}{dx} = \frac{d\Psi'(x')}{dx'} \frac{dx'}{dx} = \frac{1}{r_0} \frac{d\Psi'(x')}{dx'}, \quad (2.82)$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\mu(x)} \frac{d\Psi(x)}{dx} \right) &= \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\mu'(x')} \frac{1}{r_0} \frac{d\Psi'(x')}{dx'} \right) \\
&= \frac{1}{r_0} \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{\mu'(x')} \frac{d\Psi'(x')}{dx'} \right) \frac{dx'}{dx} \\
&= \frac{1}{r_0^2} \frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{\mu'(x')} \frac{d\Psi'(x')}{dx'} \right). \tag{2.83}
\end{aligned}$$

Substituindo as Eqs. (2.81) e (2.83) na Eq. (2.80), temos que

$$-\frac{d}{dx'} \left(\frac{1}{\mu'(x')} \frac{d\Psi'(x')}{dx'} \right) + U''(x')\Psi'(x') = E'\Psi'(x'). \tag{2.84}$$

Por motivo de conveniência tomaremos a notação menos exaustiva retirando as linhas (') e trocando x' por z , assim

$$-\frac{d}{dz} \left(\frac{1}{\mu(z)} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right) + U(z)\Psi(z) = E\Psi(z). \tag{2.85}$$

Até então, o que fizemos foi apenas escrever a equação de Schrödinger em uma forma mais compacta e adimensional. O próximo passo é aplicar a técnica de diferenças finitas na Eq. (2.85). Faremos isso, escrevendo a função de onda como uma função discreta com N passos, tal que, $\Psi(z) = \Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots, \Psi_N$, sendo h o tamanho do passo, que em nosso caso adotamos como uniforme, isto é, a distância entre dois pontos z_i e z_{i+1} é constante, de valor h , independente do ponto tomado no eixo z , como vemos na Figura 35.

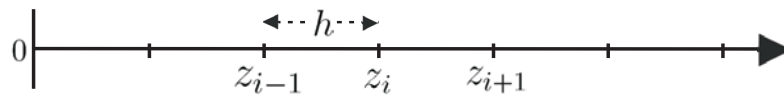


Figura 35: Variação unidimensional ao longo do eixo z com passo h entre dois pontos adjacentes.

A derivada primeira no caso contínuo é definida como

$$\frac{df(z)}{dz} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{f(z + \Delta z) - f(z)}{\Delta z}, \tag{2.86}$$

que pode ser escrita no caso discreto pelas seguintes maneiras, tomando a derivada:

- pela direita:

$$\frac{df(z)}{dz} = \frac{f(z + h) - f(z)}{h} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}, \tag{2.87}$$

- pela esquerda:

$$\frac{df(z)}{dz} = \frac{f(z) - f(z - h)}{h} = \frac{f_i - f_{i-1}}{h}. \tag{2.88}$$

- e através da média:

$$\frac{df(z)}{dz} = \frac{f(z+h) - f(z-h)}{2h} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}. \quad (2.89)$$

Encontraremos agora o primeiro termo da Eq. (2.85). Para isso aplicaremos primeiramente a derivada pela esquerda

$$\frac{d\Psi(z)}{dz} = \frac{\Psi(z) - \Psi(z-h)}{h} = \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{h}, \quad (2.90)$$

e em seguida aplicaremos a derivada pela direita. Temos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{\mu(z)} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right) &= \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{\mu(z)} \frac{\Psi(z) - \Psi(z-h)}{h} \right) \\ &= \frac{1}{h} \left[\frac{1}{\mu(z+h)} \frac{\Psi(z+h) - \Psi(z-h+h)}{h} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\mu(z)} \frac{\Psi(z) - \Psi(z-h)}{h} \right] \\ &= \frac{1}{h^2} \left[\Psi(z+h) \left(\frac{1}{\mu(z+h)} \right) \right. \\ &\quad \left. - \Psi(z) \left(\frac{1}{\mu(z+h)} + \frac{1}{\mu(z)} \right) + \Psi(z-h) \left(\frac{1}{\mu(z)} \right) \right]. \quad (2.91) \end{aligned}$$

Substituindo esse resultado na Eq. (2.85):

$$-\Psi(z+h) \left(\frac{1}{\mu(z+h)h^2} \right) + \Psi(z) \left(\frac{1}{\mu(z+h)h^2} + \frac{1}{\mu(z)h^2} + U(z) \right) - \Psi(z-h) \left(\frac{1}{\mu(z)h^2} \right) = E\Psi(z), \quad (2.92)$$

e escrevendo-a em passos discretos de Ψ_i e U_i , temos que a equação de Schrödinger para um *grid* uniforme é dada por

$$-\Psi_{i+1} \left(\frac{1}{\mu_{i+1}h^2} \right) + \Psi_i \left(\frac{1}{\mu_{i+1}h^2} + \frac{1}{\mu_ih^2} + U_i \right) - \Psi_{i-1} \left(\frac{1}{\mu_ih^2} \right) = E\Psi_i, \quad (2.93)$$

que pode ser escrita na forma matricial $Z\Psi = E\Psi$, onde Z é

$$Z = \begin{pmatrix} \left[\frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} \right) + U_1 \right] & -\frac{1}{h^2\mu_1} & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{1}{h^2\mu_1} & \left[\frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{\mu_2} + \frac{1}{\mu_3} \right) + U_2 \right] & -\frac{1}{h^2\mu_2} & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{h^2\mu_2} & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -\frac{1}{h^2\mu_{N-1}} & \left[\frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{\mu_N} + \frac{1}{\mu_{N+1}} \right) + U_N \right] \end{pmatrix}. \quad (2.94)$$

Vemos na Eq. (2.94) que a matriz Z é simétrica, isto é, é uma matriz quadrada ($N \times N$) com sua transposta sendo igual à sua inversa, $Z^\dagger = Z^{-1}$ e $Z^{-1}Z = 1$. Dessa

forma, precisamos considerar apenas duas diagonais relevantes, a diagonal principal e uma das duas diagonais adjacentes a esta, superior ou inferior. Assim, definindo os seguintes elementos da diagonal principal e da diagonal adjacente respectivamente como

$$\begin{aligned} D_i &= \frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{\mu_i} + \frac{1}{\mu_{i+1}} \right) + U_i & \text{com } i = 1, 2, \dots, N, \\ A_i &= -\frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{\mu_i} \right) & \text{com } i = 1, 2, \dots, N-1, \end{aligned} \quad (2.95)$$

podemos escrever de forma resumida a equação matricial $Z\Psi = E\Psi$ como

$$\begin{pmatrix} D_1 & A_1 & 0 & \dots & 0 \\ A_1 & D_2 & A_2 & \dots & 0 \\ 0 & A_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & A_{N-1} \\ 0 & 0 & \dots & A_{N-1} & D_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{i-1} \\ \Psi_i \\ \Psi_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{i-1} \\ \Psi_i \\ \Psi_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (2.96)$$

Vemos pela Eq. (2.95) que qualquer termo adicional na direção z como, por exemplo, os potenciais devido a campos elétricos externos, deve ser incluído apenas na diagonal principal D_i da matriz. Como resultado da técnica de diferenças finitas aplicada ao sistema, encontramos o Hamiltoniano discretizado representado por uma matriz $N \times N$ tridiagonal simétrica, cujas autofunções são matrizes coluna de ordem N

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \vdots \\ \Psi_N \end{pmatrix}. \quad (2.97)$$

Agora com a matriz do Hamiltoniano na forma tridiagonal, basta usarmos alguma subrotina computacional para diagonalizar essa matriz e encontrar os seus autovalores e autovetores. Exemplos de subrotinas que diagonalizam matrizes tridiagonais simétricas são as rotinas DSTEVX da LAPACK e a IMTQL2 da EISPACK [70].

Ao invés de aplicarmos a discretização primeiramente pela esquerda e depois pela direita, originando as diagonais dadas pela Eq. (2.95), poderíamos ter aplicado primeiramente a derivada pela direita e depois pela esquerda. Dessa forma obteríamos as seguintes relações para os elementos das diagonais

$$\begin{aligned} D_i &= \frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{\mu_i} + \frac{1}{\mu_{i-1}} \right) + U_i & \text{com } i = 1, 2, \dots, N, \\ A_i &= -\frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{\mu_{i-1}} \right) & \text{com } i = 1, 2, \dots, N-1, \end{aligned} \quad (2.98)$$

mas se agora tomarmos as médias dos resultados das duas ordens da aplicação da derivada discreta começando pela esquerda Eq. (2.95) e pela direita Eq. (2.98), obteremos que

$$\begin{aligned} D_i &= \frac{1}{2h^2} \left(\frac{1}{\mu_{i-1}} + \frac{2}{\mu_i} + \frac{1}{\mu_{i+1}} \right) + U_i \quad \text{com} \quad i = 1, 2, \dots, N, \\ A_i &= -\frac{1}{2h^2} \left(\frac{1}{\mu_{i-1}} + \frac{1}{\mu_{i+1}} \right) \quad \text{com} \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \end{aligned} \quad (2.99)$$

Durante todo o trabalho resolvemos as equações diferenciais unidimensionais utilizando a Eq. (2.99) para as diagonais do Hamiltoniano, assumindo a massa efetiva um parâmetro constante ao longo da estrutura, tal que a Eq. (2.99) torna-se:

$$\begin{aligned} D_i &= \frac{2}{m^*h^2} + U_i \quad \text{com} \quad i = 1, 2, \dots, N, \\ A_i &= -\frac{1}{m^*h^2} \quad \text{com} \quad i = 1, 2, \dots, N, \end{aligned} \quad (2.100)$$

onde o n -ésimo termo de A_i deve ser agora considerado, pois a função de onda do elétron no anel possui periodicidade angular, ou seja, $\Psi(\theta) = \Psi(\theta + 2\pi)$, que impõe que $\Psi_{N+1} = \Psi_0$. Dessa forma, podemos escrever a matriz do Hamiltoniano como

$$\begin{pmatrix} D_1 & A_1 & 0 & \dots & A_N \\ A_1 & D_2 & A_2 & \dots & 0 \\ 0 & A_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & A_{N-1} \\ A_N & 0 & \dots & A_{N-1} & D_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{i-1} \\ \Psi_i \\ \Psi_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \vdots \\ \Psi_{i-1} \\ \Psi_i \\ \Psi_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (2.101)$$

Pela Eq. (2.101) vemos que a matriz é agora uma matriz tridiagonal com dois elementos fora das diagonais, principal e adjacentes, diferentes de zero, sendo $(1, N) = (N, 1) = A_N$. Portanto, ao implementarmos o método computacional devemos adicionar a condição de periodicidade.

Especificamente, para o problema de autovalor do anel quântico ideal, Eq. (2.45), com o Hamiltoniano dado pela Eq. (2.41), encontraremos agora os valores dos elementos das diagonais, principal e secundárias, operando de maneira análoga ao que fizemos no início da presente seção para a Eq. (2.77). Primeiramente escrevendo a Eq. (2.41) em coordenadas adimensionais, tal que a equação de Schrödinger torna-se:

$$-\frac{1}{\bar{R}^2} \frac{d^2\Psi(\theta)}{d\theta^2} - \frac{i\hbar\omega_c}{2R_y} \frac{d\Psi(\theta)}{d\theta} + \frac{m^*\omega_c^2}{8R_y} \bar{R}^2 r_0^2 + \bar{V}(R, \theta, 0) = \bar{E}\Psi(\theta), \quad (2.102)$$

onde $\bar{R} = R/r_0$, $\bar{V} = V/R_y$ e $\bar{E} = E/R_y$, com R_y e r_0 sendo a energia efetiva de Rydberg e o raio de Bohr, respectivamente definidos pelas Eqs. (2.78) e (2.79).

Aplicaremos o esquema de diferenças finitas. Para isso reescreveremos a função de onda e o potencial como $\Psi(\theta) = \Psi_i$ e $\bar{V}(R, \theta, 0) = \bar{V}_i$, com $i = 1, 2, 3, \dots, N$, e substituiremos as derivadas primeira e segunda por:

$$\frac{d\Psi(\theta)}{d\theta} = \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_{i-1}}{2\Delta\theta} \quad \text{e} \quad \frac{d^2\Psi(\theta)}{d\theta^2} = \frac{\Psi_{i+1} - 2\Psi_i + \Psi_{i-1}}{\Delta\theta^2}, \quad (2.103)$$

onde $\Delta\theta$ é uma variação angular muito pequena. Com essa aproximação, e realizando algumas manipulações, obtemos que a Eq. (2.102) fica:

$$A\Psi_{i+1} + D_i\Psi_i + B\Psi_{i-1} = \bar{E}\Psi_i, \quad (2.104)$$

onde

$$A = \left[-\frac{1}{\bar{R}^2\Delta\theta^2} - \frac{i\hbar\omega_c}{4R_y\Delta\theta} \right], \quad (2.105)$$

$$D_i = \left[\frac{2}{\bar{R}^2\Delta\theta^2} + \frac{m^*\omega_c^2}{8R_y}\bar{R}^2r_0^2 + \bar{V}_i \right] \quad (2.106)$$

e

$$B = \left[-\frac{1}{\bar{R}^2\Delta\theta^2} + \frac{i\hbar\omega_c}{4R_y\Delta\theta} \right]. \quad (2.107)$$

Escrevendo a Eq. (2.104) na forma matricial, temos que:

$$\begin{pmatrix} D_1 & A & 0 & \dots & B \\ B & D_2 & A & \dots & 0 \\ 0 & B & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & A \\ A & 0 & \dots & B & D_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \vdots \\ \Psi_i \\ \vdots \\ \Psi_N \end{pmatrix} = \bar{E} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \vdots \\ \Psi_i \\ \vdots \\ \Psi_N \end{pmatrix}, \quad (2.108)$$

sendo essa a equação a ser resolvida numericamente.

2.4.2 Numérico versus analítico

Durante todo o trabalho calculamos a influência de um campo magnético na direção perpendicular ao plano do anel sobre seus autoestados ao se considerar ou não potenciais perturbativos oriundos de forças externas. No presente capítulo consideramos apenas as discussões analíticas na formação da base do problema do anel quântico ideal e o caso simples da solução na ausência de qualquer perturbação, onde encontramos analiticamente, na Seção 2.2, o efeito Aharonov-Bohm.

Como sabemos, é de grande importância avaliar a validade do programa desenvolvido

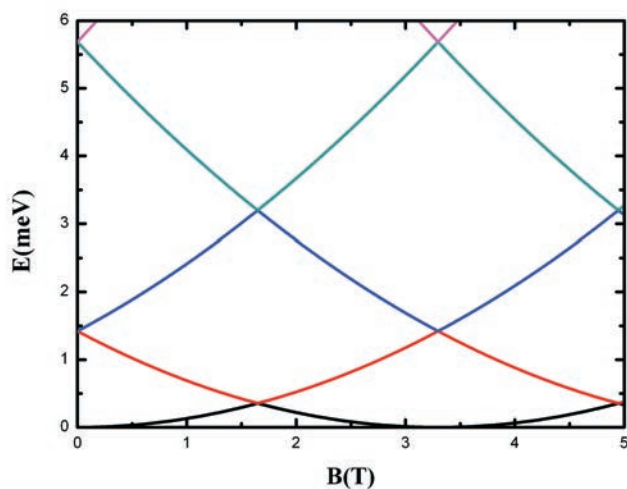


Figura 36: Espectro de energia de um anel quântico ideal sob influência de um campo magnético perpendicular ao plano do anel, onde se verifica o efeito Aharonov-Bohm, que foi calculado numericamente.

numericamente, que foi construído utilizando-se a técnica de diferenças finitas comentada anteriormente na Seção 2.4.1, já que o utilizaremos na solução dos problemas ao longo de toda a dissertação. Dessa forma, como sabemos a solução exata analítica para um dos casos tratados, podemos utilizá-la para comparar com o resultado obtido pelo programa numérico e então verificar sua validade. Ao compararmos os resultados numérico (Figura 36) e analítico (Figura 34) para o caso sem a influência de perturbações externas, vemos que os gráficos apresentam o mesmo comportamento, confirmando assim a confiabilidade do programa desenvolvido.

Pela solução numérica, Figura 36, podemos observar as energias oscilando, mas não podemos avaliar nada a respeito da causa das oscilações. Porém pela Figura 34, podemos avaliar que ao aumentarmos o valor do campo magnético, os estados não permanecem com um valor de momento angular fixo, mas na verdade trocam à medida que aumentamos o campo magnético B . Vemos também que nos pontos em que há a troca do momento angular existe mais de um estado com o mesmo valor de energia, isto é, temos assim estados degenerados. As oscilações periódicas do espectro de energia à medida que o campo magnético aumenta, devido as transições do momento angular, são uma manifestação do efeito Aharonov-Bohm, discutido anteriormente.

Capítulo 3

Efeitos de impurezas e campos elétricos sobre o espectro de energia de anéis quânticos

Neste capítulo utilizaremos a equação de Schrödinger transformada, Eq. (2.63), após considerarmos a transformação de *gauge*, desenvolvida na Seção 2.3.1, em que já se considerou no Hamiltoniano efetivo a presença de campo magnético na direção perpendicular ao plano do anel. Inicialmente estudaremos as influências de uma perturbação devido à presença de campo elétrico no plano do anel, com ou sem a influência do campo magnético, respectivamente nas Seções 3.1.1 e 3.1.2. Por fim, analisaremos o que acontece com o espectro de energia se localizarmos uma ou mais impurezas ao longo do anel de maneira simétrica, assimétrica e com uma certa aleatoriedade, Seção 3.2.

3.1 Efeitos devido a campos elétricos no plano

Agora nosso sistema é perturbado, pois implementamos um campo elétrico no plano do anel, constante e uniforme, onde consideramos a direção de aplicação ao longo do eixo x , como mostra a Figura 37. Assim, o potencial V_{def} devido a tal força externa é dado por

$$V_{def} = V_{elec} = eFx = eFR \cos(\theta) \quad (3.1)$$

onde usamos a letra F para designar a amplitude do campo elétrico (\vec{F}).

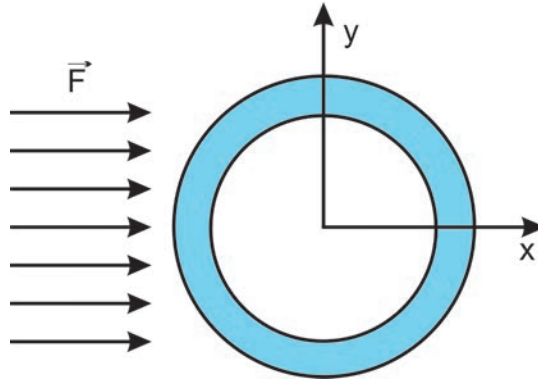


Figura 37: Representação da direção do campo elétrico no plano do anel, ao longo do eixo x .

Vamos abordar dois casos separadamente: o primeiro, o campo magnético externo é zero ($B = 0$), discutido na Seção 3.1.1, e o segundo caso, consideramos um campo magnético externo diferente de zero ($B \neq 0$), discutido na Seção 3.1.2.

3.1.1 Campo magnético igual a zero

Façamos primeiramente uma previsão qualitativa do espectro de energias nesse caso. Analisando a forma do potencial elétrico, dada pela Eq. (3.1) e que está representada na Figura 38, vemos que, devido ao campo elétrico, os elétrons vão tender a localizar-se próximos da região onde $\theta = \pi$, região onde o potencial é mínimo, já que $eFR > 0$ e $\cos(\theta = \pi) = -1$, levando a $V_{def}(\pi) = -eFR$, apresentando um maior confinamento de elétrons.

Dessa forma, é de se esperar que os níveis mais baixos de energia apresentem estados que estão localizados próximos do mínimo de potencial, região $\theta = \pi$, enquanto na parte das altas energias, para $E/eFR \gg 1$, os estados se comportam de maneira parecida ao caso da ausência de perturbação, pois quanto mais distante do ponto $\theta = \pi$ menos a partícula perceberá a influência do campo, de modo que as soluções devem ser as de um anel quântico ideal não perturbado, como podemos observar na representação esquemática dada pela Figura 38.

Para obter as soluções do caso perturbado devido a um campo elétrico no plano do anel, por enquanto, sem a influência de campo magnético, devemos complementar o problema da equação de Schrödinger dado pelo Hamiltoniano efetivo Eq. (2.61) com as mesmas condições cíclicas de periodicidade $\Psi_n(\theta) = \Psi_n(\theta + 2\pi)$ para a situação não perturbada, encontrada ao fazermos $B = 0$ na Eq. (2.66). Em adição, nós vemos ainda a partir da forma do potencial que ele é simétrico com relação ao ponto $\theta = \pi$, assim teremos

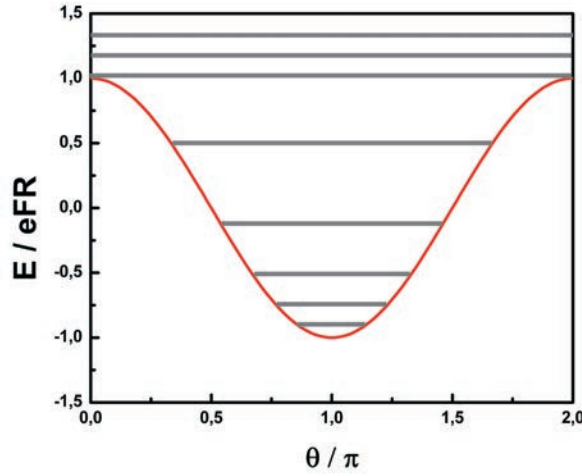


Figura 38: Gráfico mostrando a forma do potencial elétrico.

que as funções de onda também devem ser simétricas ou anti-simétricas com relação a esse ponto. Logo elas serão funções ímpares ou pares com respeito ao ponto $\theta = \pi$. Além disso, a periodicidade do potencial nos pontos $\theta = 0$ e $\theta = 2\pi$ implica também que a função de onda deve ser par ou ímpar com respeito a esses pontos. Se a solução é par com respeito ao centro ($\theta = \pi$), terá derivada angular nula nesse ponto e também deve possuir derivada nula nas fronteiras do potencial, nos pontos $\theta = 0$ e $\theta = 2\pi$. Ao contrário, se a solução é ímpar com respeito ao centro, então a função de onda será nula no centro e também nos pontos de fronteira. Esses resultados estão resumidos a seguir:

$$\Psi_n(\theta + 2\pi) = \Psi_n(\theta) \quad (3.2)$$

$$\Psi_n(\pi + \theta) = \begin{cases} +\Psi_n(\pi - \theta) & , \quad (\text{par}) & \Rightarrow & \frac{d\Psi_n(\theta)}{d\theta} \Big|_{\theta=0,\pi,2\pi} = 0 \\ -\Psi_n(\pi - \theta) & , \quad (\text{ímpar}) & \Rightarrow & \Psi_n(\theta) \Big|_{\theta=0,\pi,2\pi} = 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

Essas condições podem ser usadas para, separadamente, procurar soluções pares e ímpares, fato que pode ser de grande ajuda numérica. De fato, é esperado que as duas primeiras soluções da parte de energia mais baixa do espectro sejam respectivamente uma solução par e uma solução ímpar. Essas duas soluções apresentam o mesmo comporta-

mento das duas primeiras soluções do potencial harmônico obtido ao expandir a Eq. (3.1) em série de Taylor em torno do ponto $\theta = \pi$ de maior confinamento eletrônico,

$$V_{elec} \approx -eFR + \frac{eFR}{2}(\theta - \pi)^2, \quad (3.4)$$

ao consideramos apenas os primeiros termos da expansão. Podemos visualizar mais claramente o comportamento harmônico do potencial ao fazermos a substituição da relação $\Omega = \sqrt{eF/m^*R}$, obtendo

$$V_{elec} \approx V_{elec}(\pi) + \frac{m^*\Omega^2}{2}R^2(\theta - \pi)^2, \quad (3.5)$$

e da relação $l = R(\theta - \pi)$, obtendo um Hamiltoniano de um problema de oscilador harmônico dado por

$$H_{eff} \approx \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dl^2} + V_{elec}(\pi) + \frac{m^*\Omega^2}{2}l^2. \quad (3.6)$$

Assim, para anéis quânticos com raios grandes sujeito a campos elétricos com intensidade pequena, a separação de energia entre os dois primeiros estados confinados pode ser muito fraca, dada por

$$\Delta = E_{n+1} - E_n = \hbar\Omega, \quad (3.7)$$

onde utilizamos a energia do oscilador harmônico unidimensional, $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

Agora, de fato, resolvendo a equação diferencial do Hamiltoniano efetivo, Eq. (2.63), substituindo o potencial perturbativo dado pela Eq. (3.1), obtemos:

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^*R^2} \frac{d^2}{d\theta^2} + eFR \cos(\theta) \right\} \Psi(\theta) = E\Psi(\theta). \quad (3.8)$$

Fazendo a mudança de variável

$$\theta = 2x, \quad (3.9)$$

temos que

$$\frac{d^2}{d\theta^2} = \frac{d}{d\theta} \left(\frac{d}{d\theta} \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \frac{dx}{d\theta} \right) \frac{dx}{d\theta}, \quad (3.10)$$

ou ainda $\frac{d^2}{d\theta^2} = \frac{1}{4} \frac{d^2}{dx^2}$. Tomando

$$a = \frac{8m^*R^2}{\hbar^2}E \quad \text{e} \quad 2q = \frac{8m^*R^2}{\hbar^2}eFR \quad (3.11)$$

na Eq. (3.8), obtemos a nova equação diferencial a ser resolvida:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + [a - 2q \cos(2x)] \Psi = 0. \quad (3.12)$$

As soluções são as funções de *Mathieu*¹ [72] de 1ª e 2ª espécie. Assim, a solução geral é dada pela combinação linear dessas funções linearmente independentes, sendo uma delas uma função par e a outra ímpar na variável x [46, 72]:

$$\Psi_n(\theta) = A_n y_1 \left(a, q, \frac{\theta}{2} \right) + B_n y_2 \left(a, q, \frac{\theta}{2} \right). \quad (3.13)$$

Determinamos o espectro de energia através da aplicação das condições de contorno nessa função implícita da energia, que são:

- A função de onda deve ser contínua e periódica:

$$\Psi_n(0) = \Psi_n(2\pi) \quad (3.14)$$

- A derivada primeira da função de onda deve também ser contínua:

$$\left. \frac{d\Psi_n}{d\theta} \right|_{\theta=0} = \left. \frac{d\Psi_n}{d\theta} \right|_{\theta=2\pi} \quad (3.15)$$

Daí, obtemos uma equação transcendental e determinamos o espectro de energia a partir do parâmetro “a”, já que o parâmetro “q” é uma constante em nosso problema.

3.1.2 Campo magnético diferente de zero

Ao usarmos a transformação de *gauge*, Eq. (2.62), para eliminar a parte imaginária devida ao campo magnético no Hamiltoniano efetivo, obtemos a mesma equação diferencial para a função $\Phi(\theta)$, a ser resolvida, encontrada no caso sem campo magnético, dada pela Eq. (3.8), exceto pela existência de condições de fronteiras dependentes de B . Fazendo as mesmas mudanças de variáveis (3.9) e (3.11), obteremos a mesma equação diferencial (3.12), com solução geral para $\Phi(\theta)$ dada pela combinação linear das funções de *Mathieu* de 1ª e 2ª espécie:

$$\Phi_n(\theta) = A_n(B) y_1 \left(a, q, \frac{\theta}{2} \right) + B_n(B) y_2 \left(a, q, \frac{\theta}{2} \right), \quad (3.16)$$

onde agora os coeficientes das funções de *Mathieu* dependem do campo magnético, e são determinados como no outro caso, pelas seguintes condições de contorno, dependentes de B :

¹As funções foram introduzidas pela primeira vez por *Émile Léonard Mathieu* em 1868 na solução de seu primeiro trabalho sobre as vibrações das membranas helicoidais [71].

- Para a continuidade da função de onda,

$$\Phi_n(0) = \Phi_n(2\pi)e^{\left\{-i2\pi\frac{\phi}{\phi_0}\right\}}. \quad (3.17)$$

- Para a continuidade da derivada primeira da função de onda,

$$\left.\frac{d}{d\theta}\Phi(\theta)\right|_{\theta=0} = \left.\frac{d}{d\theta}\Phi(\theta)\right|_{\theta=2\pi} e^{\left\{-i2\pi\frac{\phi}{\phi_0}\right\}}. \quad (3.18)$$

Da equação transcendental resultante da aplicação dessas condições, devemos determinar o espectro de energia a partir do parâmetro “a”.

3.2 Efeitos de impurezas

Seja uma impureza ionizada localizada na posição $\vec{r}_{imp} = (R_{imp}, \theta_{imp}, z_{imp})$, ou seja, a uma distância R_{imp} do centro do anel e a uma altura z_{imp} , como pode ser observado na Figura 39. As impurezas terão cargas positivas e_{imp} , onde consideramos o módulo da carga da impureza o mesmo módulo da carga eletrônica e .

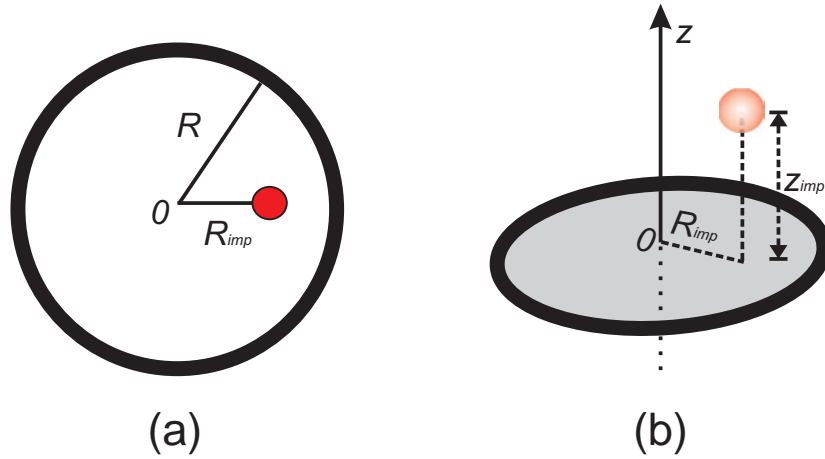


Figura 39: Representação da localização da impureza ionizada (a) vista do topo do anel, e (b) vista em perspectiva.

Temos que o potencial perturbativo gerado pela impureza positiva será um potencial atrativo dado por:

$$V_{imp}(\theta) = \frac{-ee_{imp}}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}_{imp}|}. \quad (3.19)$$

Como $\vec{R} = R\hat{\rho}$ e $\vec{r}_{imp} = R_{imp}\hat{\rho} + z_{imp}\hat{z}$, logo

$$\begin{aligned} |\vec{R} - \vec{r}_{imp}| &= \sqrt{R^2 - 2\vec{R}\cdot\vec{r}_{imp} + r_{imp}^2} \\ &= [R^2 - 2RR_{imp}\cos(\theta - \theta_{imp}) + R_{imp}^2 + z_{imp}^2]^{\frac{1}{2}} \\ &= R \left[1 - \frac{2R_{imp}\cos(\theta - \theta_{imp})}{R} + \frac{R_{imp}^2}{R^2} + \frac{z_{imp}^2}{R^2} \right]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Fazendo as seguintes substituições

$$u = \frac{R_{imp}}{R}, \quad h = \frac{z_{imp}}{R} \quad \text{e} \quad \sigma_{imp} = \frac{-e\ell_{imp}}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 R}, \quad (3.21)$$

onde $\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$ é a permissividade relativa, também chamada de constante dielétrica, dada pela razão da permissividade do material sobre a permissividade do vácuo [59], obtemos o potencial na forma

$$V_{imp}(\theta) = \frac{\sigma_{imp}}{\sqrt{1 - 2u\cos(\theta - \theta_{imp}) + u^2 + h^2}}. \quad (3.22)$$

Já para o caso de mais de uma impureza localizada ao longo do anel teremos que o potencial é dado por

$$V_{imp}(\theta) = \sum_{j=1}^N \frac{\sigma_{imp}}{\sqrt{1 - 2u_j\cos(\theta - \theta_{j_{imp}}) + u_j^2 + h_j^2}}, \quad (3.23)$$

onde $\theta_{j_{imp}}$ representa a posição angular ao longo do anel de cada j -ésima impureza. Assim, para impurezas localizadas:

- Igualmente espaçadas:

Temos nesse caso que a posição angular é dada por:

$$\theta_{j_{imp}} = \frac{2\pi}{N}(j - 1), \quad (3.24)$$

onde N é o número total de impurezas consideradas.

- Espaçadas aleatoriamente:

Observando a Figura 40, onde definimos de que maneira introduzimos a aleatoriedade na localização das impurezas, temos que as impurezas podem variar em torno das suas posições fixas quando são igualmente espaçadas de valor w , que é o peso da aleatoriedade,

representado pelos arcos de cor azul na figura, que podem assumir os seguintes valores:

$$0 \leq w \leq \frac{2\pi}{N}. \quad (3.25)$$

Como podemos ver, o valor máximo que w pode possuir é do mesmo tamanho do comprimento da distância angular entre duas impurezas adjacentes no caso de estarem simetricamente espaçadas. Assim, as impurezas agora não necessariamente estão igualmente espaçadas, porém, em nenhum caso teremos duas impurezas com a mesma localização.

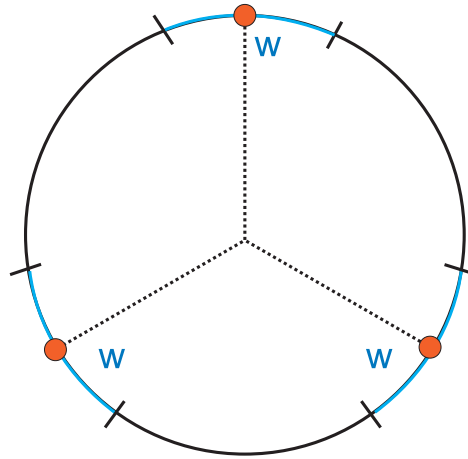


Figura 40: Representação da localização das impurezas espaçadas de maneira aleatória. O parâmetro w é o peso da aleatoriedade, representado pelo arco em azul na figura.

Dessa forma, definimos a posição $\theta_{j_{imp}}$ para o caso aleatório como

$$\theta_{j_{imp}} = \frac{2\pi}{N}(j-1) + w \left(nrand(j) - \frac{1}{2} \right), \quad (3.26)$$

onde $nrand(j)$ é o j -ésimo número aleatório gerado pela subrotina *rand48* [70], que assume os seguintes valores

$$0 \leq nrand(j) \leq 1. \quad (3.27)$$

Um exemplo da localização das impurezas é mostrado na Figura 41, para 5 impurezas, com dois pesos diferentes, em que o arco azul delimita o intervalo máximo em que a impureza pode ocupar uma posição para o peso máximo.

Na Seção 3.1.1 discutimos sobre a localização dos estados devido à forma do potencial perturbativo elétrico. De maneira análoga, veremos a seguir que o potencial atrativo devido às impurezas gera no espectro de energia estados localizados nas regiões do mínimo de potencial, tal que nesses pontos teremos uma maior concentração de estados. Caso considerássemos uma impureza negativa, nós teríamos um potencial repulsivo. A única diferença entre os dois casos é que a localização do elétron será ao redor do ponto $\theta = 0$

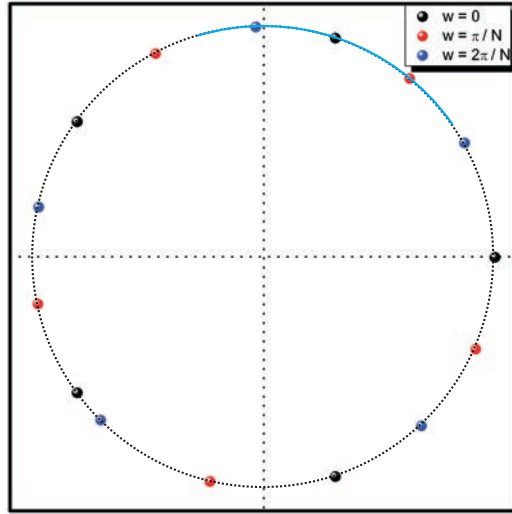


Figura 41: As localizações das cinco impurezas com pesos $w = 0, \pi/N, 2\pi/N$, respectivamente representadas pelos pontos pretos, vermelhos e azuis. O arco em azul delimita o intervalo máximo para o posicionamento da impureza ao se considerar o peso máximo $2\pi/N$.

para um centro atrativo e ao redor do ponto $\theta = \pi$ quando o potencial é repulsivo se caso a impureza estiver em $\theta = 0$.

3.3 Resultados e discussões

- Campo magnético nulo:

Resolvemos numericamente a Eq. (3.8) utilizando o método de diferenças finitas apresentado no Capítulo 2 e analisamos o seu espectro de energia ao variarmos a intensidade do campo elétrico, assumindo que o campo magnético seja zero. Os resultados obtidos podem ser observados na Figura 42.

Como podemos ver, quando aumentamos a intensidade do campo elétrico, pares de níveis de energia são divididos, isto é, a presença de campo elétrico levanta a degenerescência devido à quebra da simetria angular, pois o elétron tenderá a permanecer em uma certa região privilegiada, onde o potencial é mínimo, como já comentamos na Seção 3.1.1.

Analisando o comportamento das funções de onda do elétron no anel quântico sob influência apenas de campo elétrico externo podemos ver, através da Figura 43, que para campos elétricos de baixa intensidade, as funções de onda estão distribuídas ao longo de toda a coordenada angular, e à medida que aumentamos sua magnitude as funções de onda tendem a permanecer localizadas em torno da região de mínimo de potencial elétrico

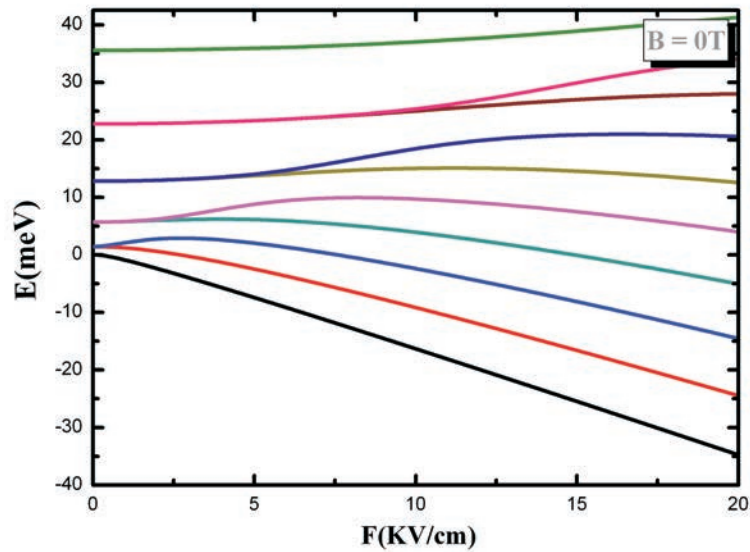


Figura 42: Variação do espectro de energia com a intensidade do campo elétrico, na ausência de campo magnético externo.

gerado pelo campo elétrico F , que apresenta um mínimo com profundidade cada vez maior à medida que aumentamos a intensidade do campo, tornando o potencial cada vez mais atrativo. Dessa forma, para campos elétricos com módulos maiores, as amplitudes dos picos dos módulos quadrados das funções de onda são também maiores do que para campos elétricos de intensidades baixas.

Para entendermos o comportamento das curvas dos estados excitados na Figura 42, em especial nas regiões em que há a quebra da degenerescência dos estados excitados, e a origem dos dois picos de maior amplitude das funções de onda para os estados excitados na Figura 43, podemos associar esses acontecimentos com a presença de um momento de dipolo elétrico, mesmo que o problema real aqui tratado com a aproximação de massa efetiva e a solução da equação de Schrödinger envolva apenas um elétron. Ao considerar esse fato e de acordo com a análise das Figuras 42 e 43, vemos que nas regiões onde ocorrem as quebras das degenerescências dos estados excitados os valores das derivadas trocam de sinal, isto é, as derivadas que eram positivas passam a ser negativas. Dessa maneira há um desalinhamento do momento de dipolo elétrico com o campo elétrico aplicado, o que explica também os dois picos de maiores amplitudes para os estados excitados afastados da região de mínimo de potencial.

- Campo magnético diferente de zero:

Da mesma forma que fizemos para o caso anterior de campo magnético igual a zero,

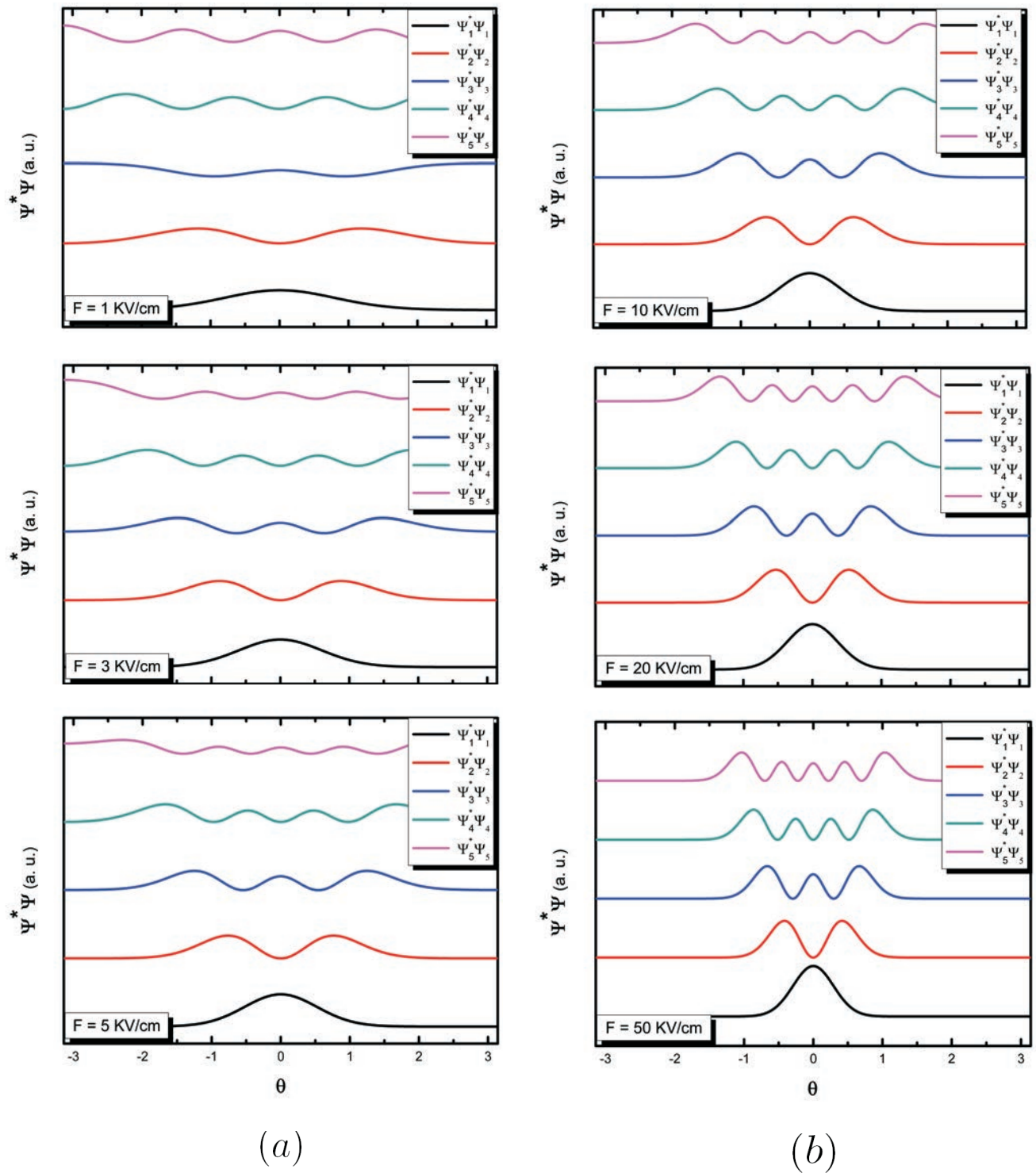


Figura 43: Módulo quadrado das funções de onda do elétron ($\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$) como função da coordenada angular θ , para os cinco primeiros estados, na ausência de campo magnético externo e considerando campo elétrico no plano do anel com diferentes intensidades.

analisamos o espectro de energia com a variação das intensidades do campo magnético e campo elétrico, como pode ser visto na Figura 44.

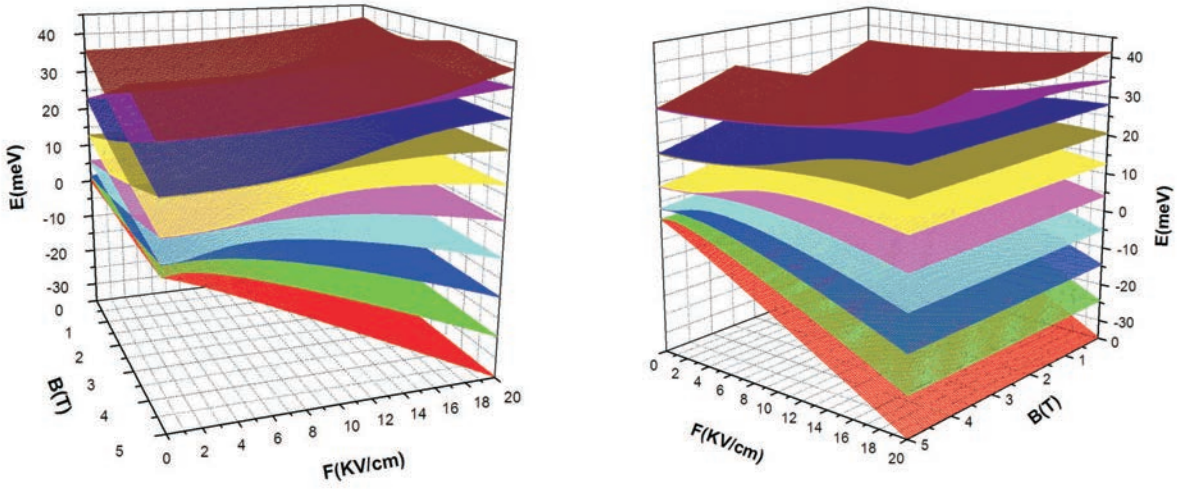


Figura 44: Variação do espectro de energia com as intensidades do campo magnético e do campo elétrico em duas perspectivas diferentes para melhor visualização da supressão do efeito Aharonov-Bohm.

Verificamos o mesmo comportamento, como na Figura 42, das divisões dos níveis de energia degenerados. Porém, observamos agora que isto reflete em um aumento das amplitudes dos *anti-crossings* do efeito Aharonov-Bohm. Vemos portanto que a presença de um campo elétrico no plano do anel destrói a invariância rotacional do anel quântico e suprime as oscilações Aharonov-Bohm para os níveis mais baixo de energia. Esses resultados estão de acordo com aqueles encontrados por A. Bruno-Alfonso e A. Latgé, referência [46], para efeitos de campos elétricos em anéis quânticos.

- Impurezas

Estudamos também os efeitos nas autoenergias devido à presença de impurezas localizadas ao longo do anel, posicionadas de maneira simétrica e assimétrica. Assumimos que as impurezas estão localizadas na linha do anel, isto é, $R_{imp} = R = 200\text{\AA}$ e com altura $z_{imp} = 10\text{\AA}$ ao plano do anel. Consideramos também que o anel é formado pela estrutura *GaAs*, que tem constante dielétrica $\epsilon = 12,9$.

Mostramos na Figura 45, para uma, duas e três impurezas, o espectro de energia com a variação do campo magnético. Para o caso de duas impurezas, as posicionamos uma em $\theta = 0$ e a outra em $\theta = \pi$. Já no caso de três impurezas, as colocamos para o caso simétrico em $\theta = 0$, $\theta = \frac{2\pi}{3}$ e $\theta = \frac{4\pi}{3}$, e para o caso assimétrico em $\theta = 0$, $\theta = \frac{\pi}{2}$ e $\theta = \pi$, como mostra a posição dos picos na Figura 46, que ilustra o perfil do potencial para as três impurezas localizadas simétrica e assimetricamente.

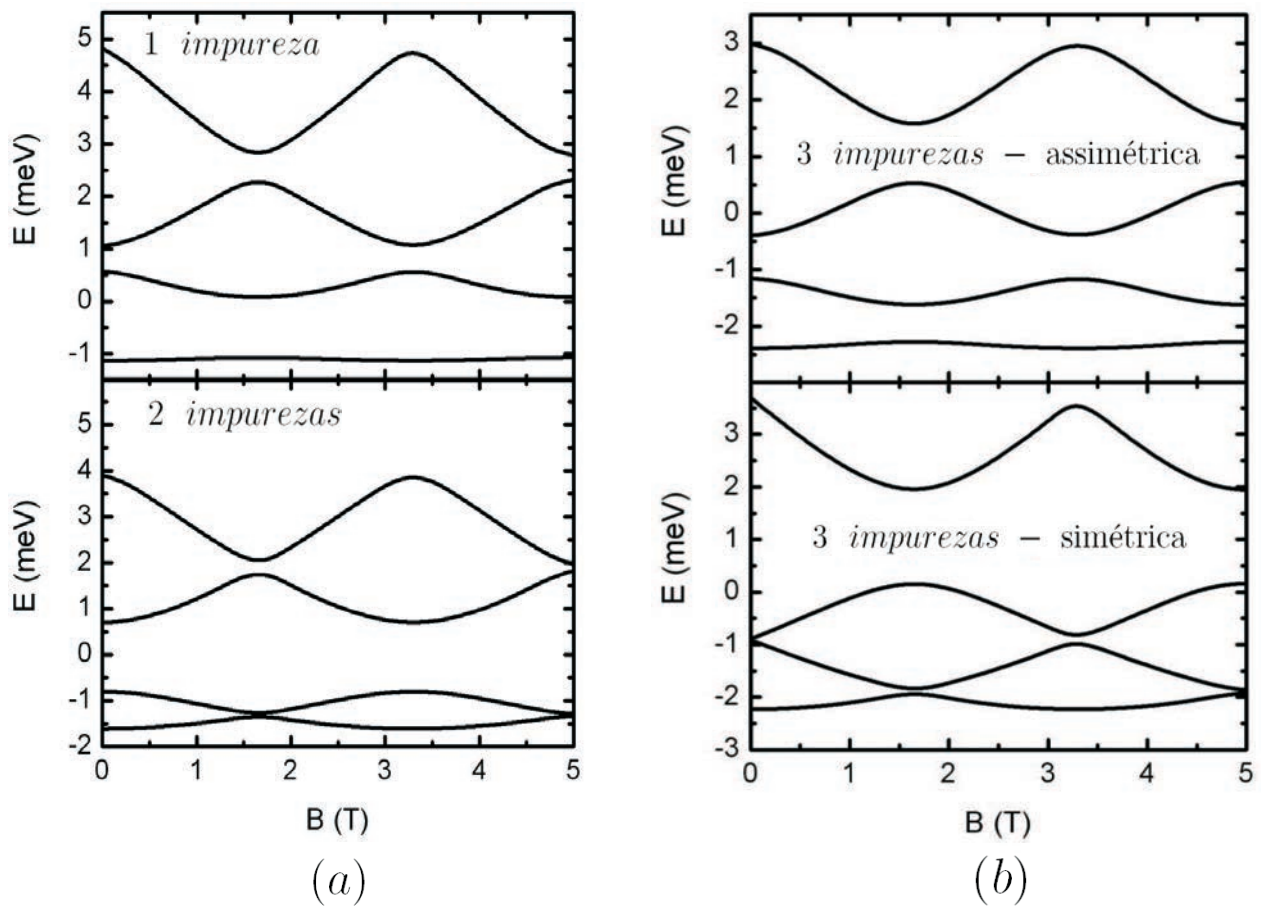


Figura 45: Espectro de energia como função do campo magnético em um anel quântico na presença de (a) uma e duas impurezas positivas (diametralmente opostas), (b) três impurezas positivas localizadas simétrica e assimetricamente.

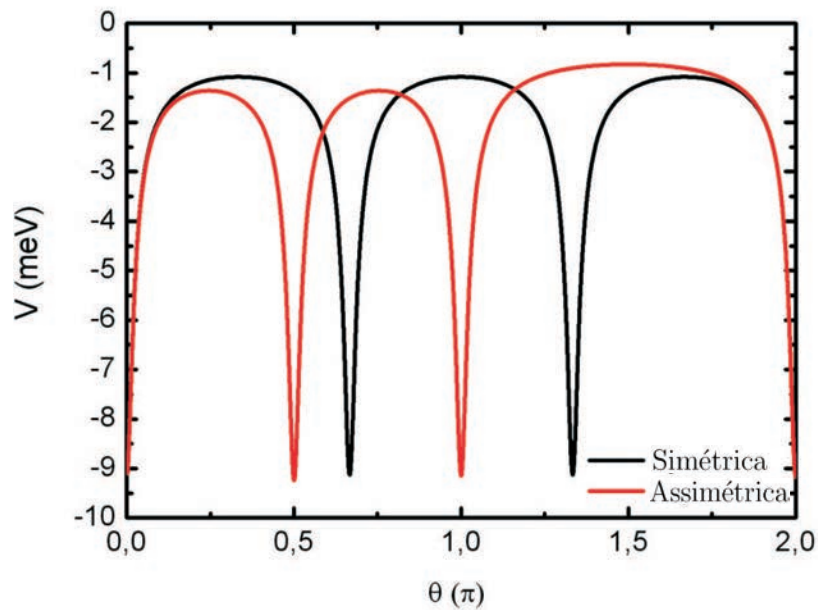


Figura 46: Potencias para três impurezas localizadas simetricamente (vermelho) e assimetricamente (preto) ao longo do anel.

Na figura 45, podemos observar no caso de uma e três impurezas assimétricas, a ausência do efeito Aharonov-Bohm em estados de energias mais baixas, enquanto para sistemas simétricos as oscilações são formadas pelo cruzamento dos estados. Em geral, como a impureza gera um potencial atrativo com a interação com o elétron, este tornar-se-á mais preso à região de maior confinamento. Dessa forma, quando o sistema apresenta uma simetria circular o elétron estará menos confinado do que estaria na presença de qualquer agente externo, não apresentando assim uma certa localização preferencial. Assim, a função de onda se espalhará igualmente ao longo do anel. Já no caso em que o sistema está organizado assimetricamente, o elétron possuirá uma região preferencial devido à quebra de simetria rotacional do anel, tal que os estados mais ligados não apresentam oscilações intensas.

Analisando ainda o caso em que as impurezas estão localizadas simetricamente, vemos na Figura 47, para três, quatro e cinco impurezas que para N impurezas teremos a formação de sub-bandas com N estados, em que os conjuntos de N estados se cruzam, e que os grupos são separados por *anti-crossings*. Tomando a mesma análise agora para o caso de impurezas localizadas aleatoriamente podemos ver na Figura 48 que para N impurezas consideradas teremos novamente N estados formando sub-bandas, só que agora esses níveis não são mais degenerados pois os *crossings* tornam-se *anti-crossings*, devido à quebra da simetria circular, que torna o efeito Aharonov-Bohm menos intenso.

A causa da acoplamento de N estados, formando sub-bandas, quando adotamos a interação de N impurezas, está relacionada com a simetria de rotação do anel. Por exemplo, no caso de três impurezas dispostas simetricamente o anel apresenta uma simetria C_3 , isto é, o sistema é invariante a uma rotação de $2\pi/3$ ao redor do eixo axial da aplicação do campo magnético. O mesmo acontece para o caso de quatro e cinco impurezas que possuem simetrias de rotação C_4 e C_5 , respectivamente. Como veremos no Capítulo 4, o mesmo comportamento da formação das sub-bandas no espectro de energia com a variação do campo magnético é observado para superrede de poços de potenciais.

Representamos nas Figuras 49 e 50 resultados obtidos através da média de dez realizações calculadas de maneira análoga aos resultados da Figura 48 para dez conjuntos de números aleatórios distintos, para os pesos da aleatoriedade $w = \pi/N$ e $w = 2\pi/N$, respectivamente. Analisando a Figura 49 podemos observar que o resultado médio, representado pelos círculos possui um comportamento similar em partes ao resultado para apenas uma realização. Temos agora a formação de apenas uma sub-banda composta pelos N primeiros estados mais localizados separada dos sucessivos níveis mais energéticos

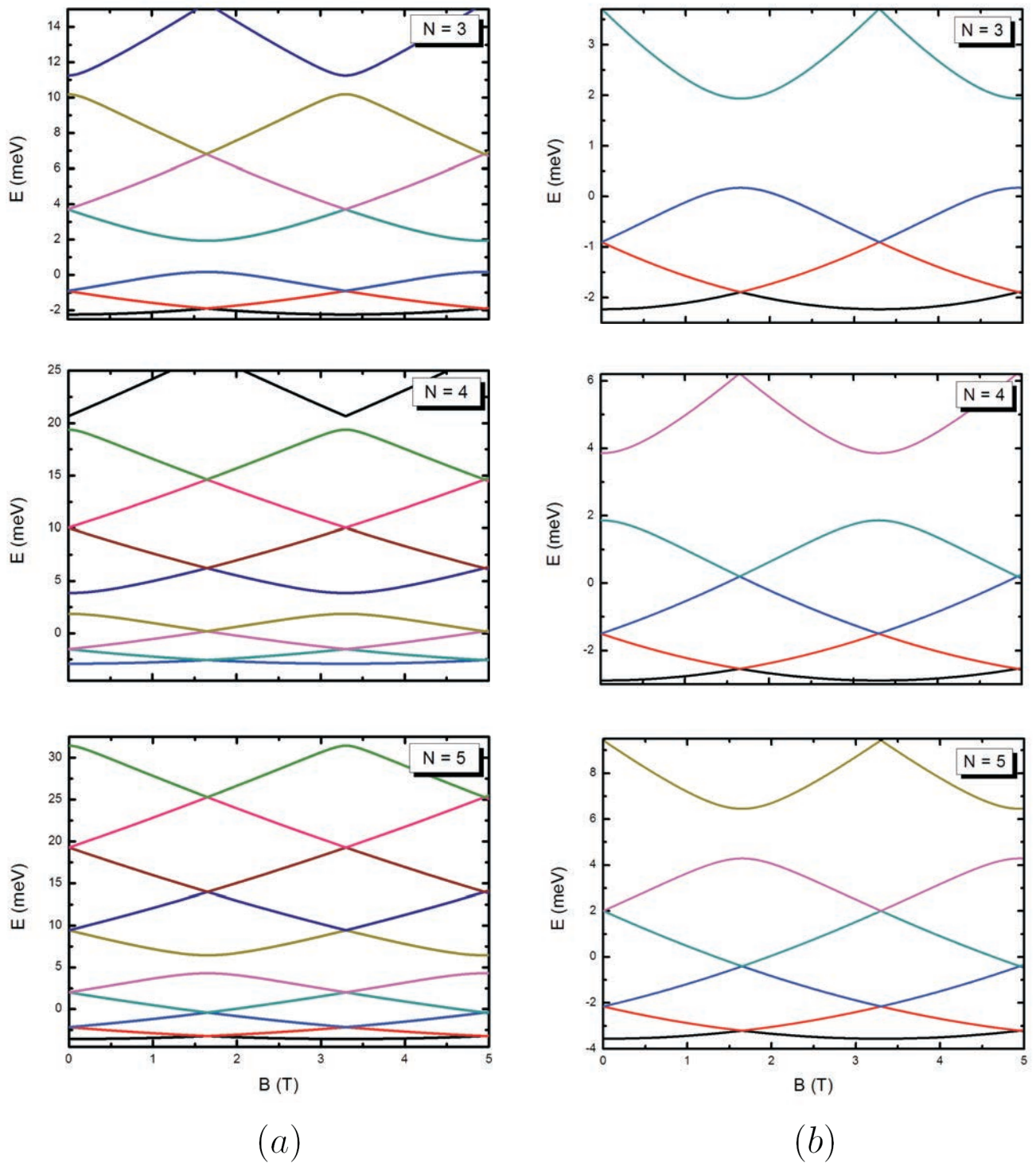


Figura 47: Espectro de energia como função do campo magnético em um anel quântico na presença de três, quatro e cinco impurezas positivas igualmente espaçadas, explicitando (a) a formação das sub-bandas compostas por N estados e (b) os $N + 1$ primeiros estados.

por um *anti-crossing* com amplitude maior do que os *anti-crossings* entre os estados da sub-banda. Já na Figura 50, construída com o peso da aleatoriedade máximo, não observamos a formação de sub-bandas: vemos apenas o surgimento dos *anti-crossings* entre os

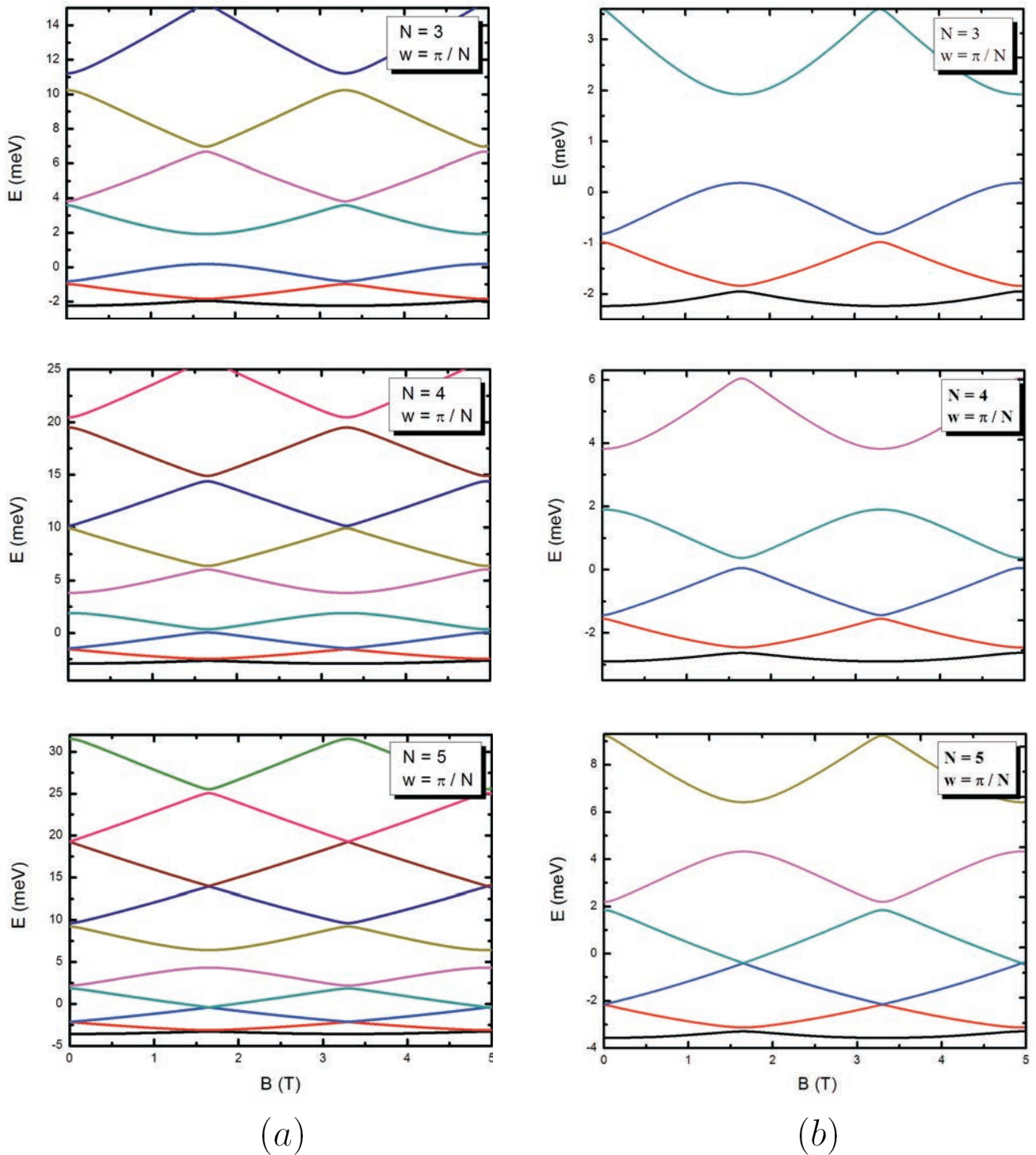


Figura 48: Espectro de energia como função do campo magnético em um anel quântico na presença de três, quatro e cinco impurezas localizadas aleatoriamente com um peso fixo, dado por $w = \pi/N$, explicitando (a) a formação das sub-bandas compostas por N estados e (b) os $N + 1$ primeiros estados.

estados como no caso de aleatoriedades menos intensas. Podemos concluir que o aumento do parâmetro peso da aleatoriedade remove totalmente qualquer resquício de simetria do

sistema, como pode ser visto quando consideramos $w = 2\pi/N$. Já no caso $w = \pi/N$, o sistema se comporta de maneira similar ao sistema simétrico para os níveis mais baixos, perdendo tal característica para os níveis mais energéticos. Em ambos os casos, Figuras 49 e 50, ao considerar o desvio padrão², vemos que a característica do surgimento dos *anti-crossings* entre os estados devido à assimetria do sistema pode ser suprimida. Isso leva a um resultado similar ao caso simétrico, apresentando *crossings* entre os estados. Faremos a mesma análise da influência da quantidade de realizações no espectro de energia do anel ao se considerar aleatoriedade no potencial, no Capítulo 4, quando estudarmos superredes formadas por poços de potenciais com profundidades aleatórias.

Outro ponto a ser observado é o que acontece quando aumentamos o peso da aleatoriedade, Eqs. (3.25) e (3.26), das posições angulares das impurezas no espectro de energia do anel, mostrado na Figura 51 para três, quatro e cinco impurezas. Podemos observar na Figura 51 que, à medida que aumentamos o peso da aleatoriedade, isto é, a possibilidade de a impureza se localizar em uma região maior ao redor do ponto em que estaria fixa se as impurezas estivessem igualmente espaçadas, aumentamos também a amplitude dos *anti-crossings* para um sistema sem simetria circular, onde as impurezas não estão igualmente espaçadas. Esse resultado mostra que a transição dos níveis de energia de um sistema simétrico para um sistema assimétrico ergue o espaçamento entre os níveis.

Na Figura 52 mostramos os módulos quadrados das funções de onda do elétron para os dez primeiros estados como função da coordenada angular, na presença de três, quatro e cinco impurezas positivas localizadas de maneira simétrica e assimétrica, admitindo nesse último caso um posicionamento aleatório regrado pela Eq. (3.26). Vemos que os N primeiros estados, para as impurezas localizadas simetricamente possuem os máximos dos picos das funções de onda na mesma posição θ , enquanto que para os sucessivos estados não observamos a mesma regra com o número de estados N dado com a mesma concavidade para os picos. Vemos que para os N primeiros estados teremos N picos. Temos assim que para os N primeiros estados a posição onde a probabilidade é máxima de encontrar o elétron tem uma probabilidade mínima para o estado seguinte. Para o caso da posições das impurezas aleatórias, podemos observar uma completa assimetria da localização da função de onda ao longo da direção angular, principalmente para os primeiros estados. Já para os estados mais delocalizados, vemos que as funções de onda têm um pouco do

²O desvio padrão de uma variável aleatória X é definido como:

$$\sigma = \sqrt{E((X - E(X))^2)} = \sqrt{E(X^2) - (E(X))^2}, \quad (3.28)$$

onde $E(X)$ é o valor esperado de X .

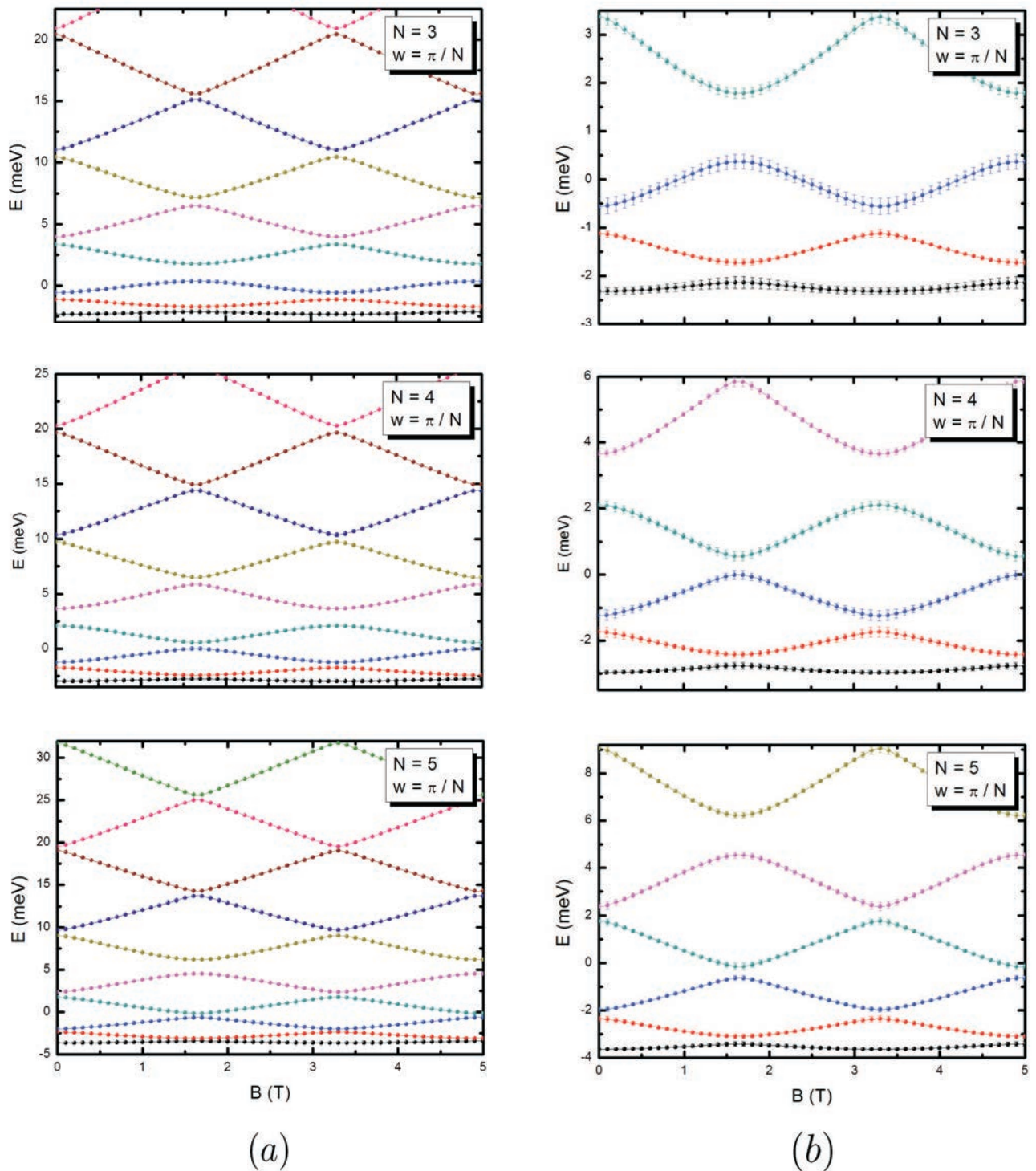


Figura 49: Comportamento médio da influência do campo magnético sobre o espectro de energia de um anel quântico na presença de três, quatro e cinco impurezas localizadas aleatoriamente com um peso fixo, dado por $w = \pi/N$, obtido pela média de dez realizações distintas incluindo o desvio padrão, explicitando (a) a separação da sub-banda com os sucessivos níveis de energia e (b) os $N + 1$ primeiros estados.

caráter simétrico, devido ao fato desses estados serem menos influenciados pela presença

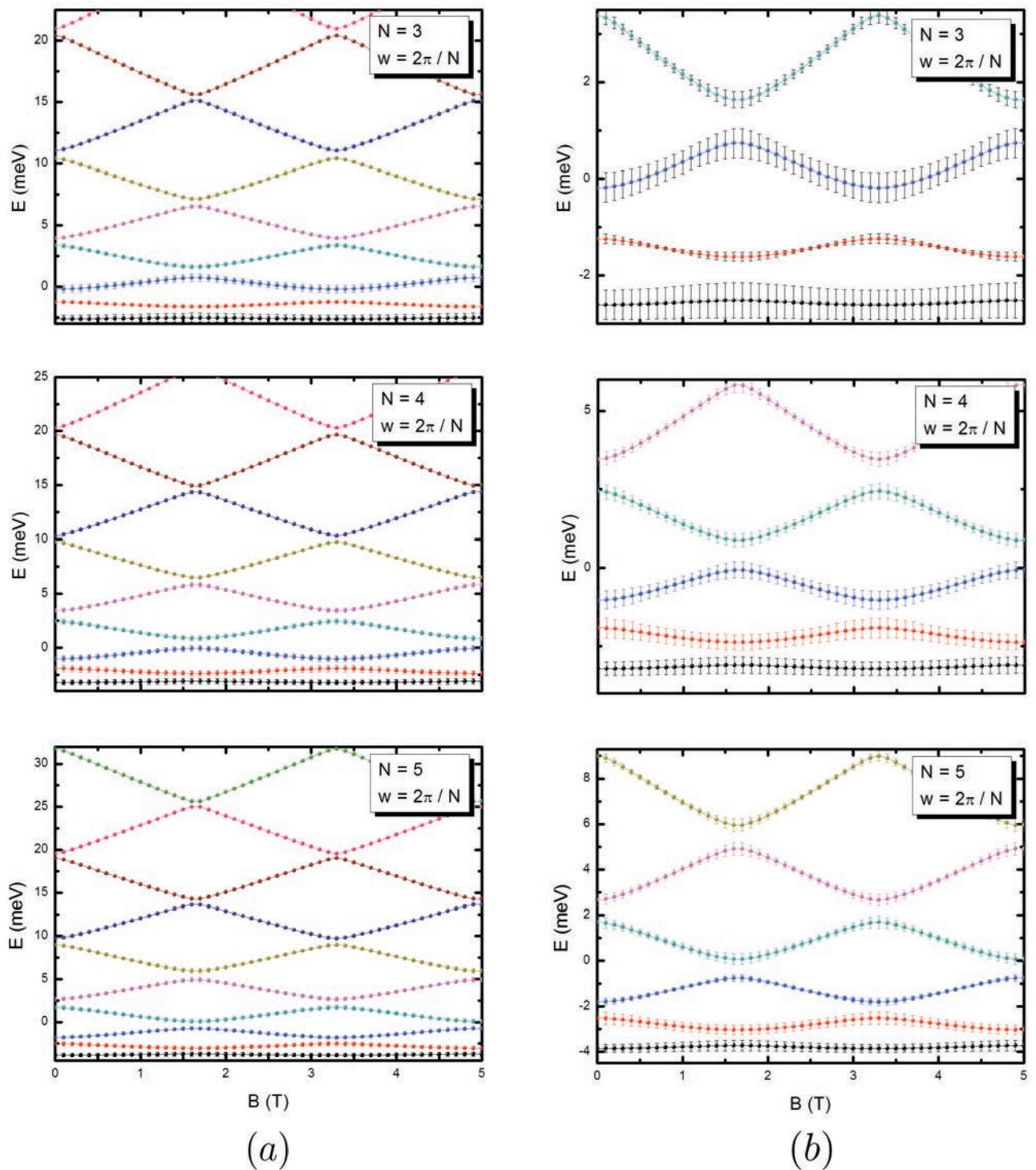


Figura 50: Comportamento médio da influência do campo magnético sobre o espectro de energia de um anel quântico na presença de três, quatro e cinco impurezas localizadas aleatoriamente com um peso fixo, dado por $w = 2\pi/N$, obtido pela média de dez realizações distintas incluindo o desvio padrão, explicitando (a) a separação dos níveis sem formação de sub-bandas e (b) os $N + 1$ primeiros estados.

das impurezas.

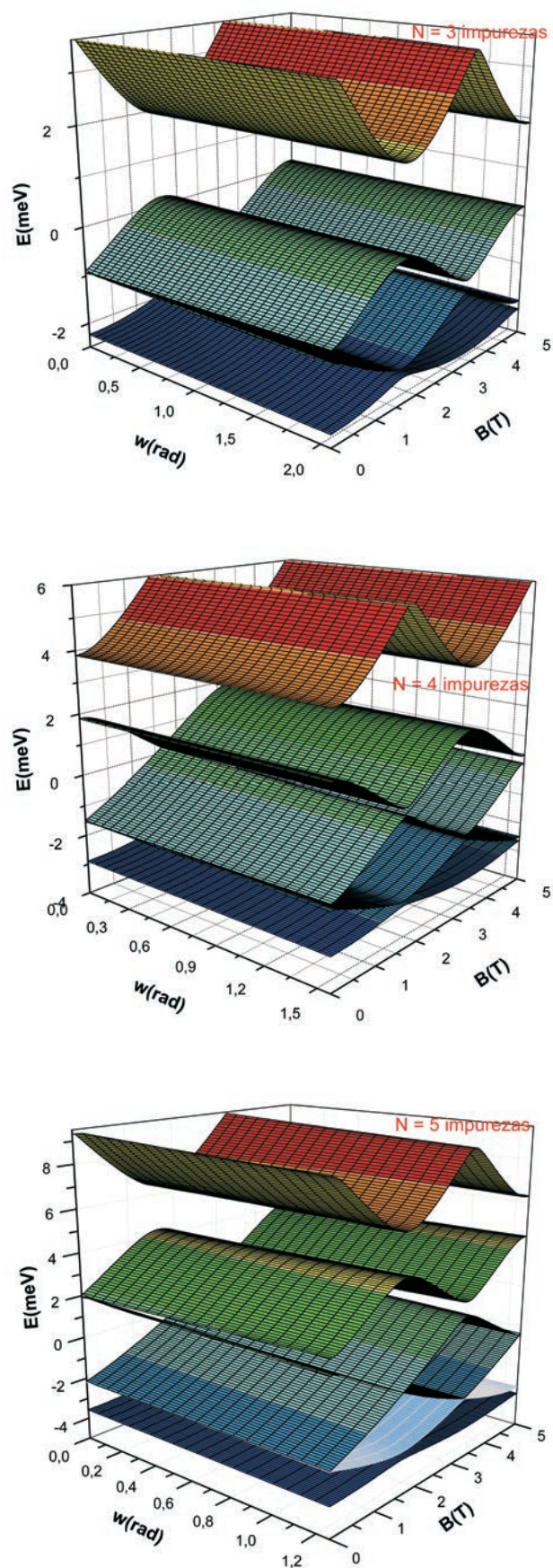


Figura 51: Espectro de energia como função do campo magnético e do peso da aleatoriedade na localização da impureza em um anel quântico na presença de três, quatro e cinco impurezas.

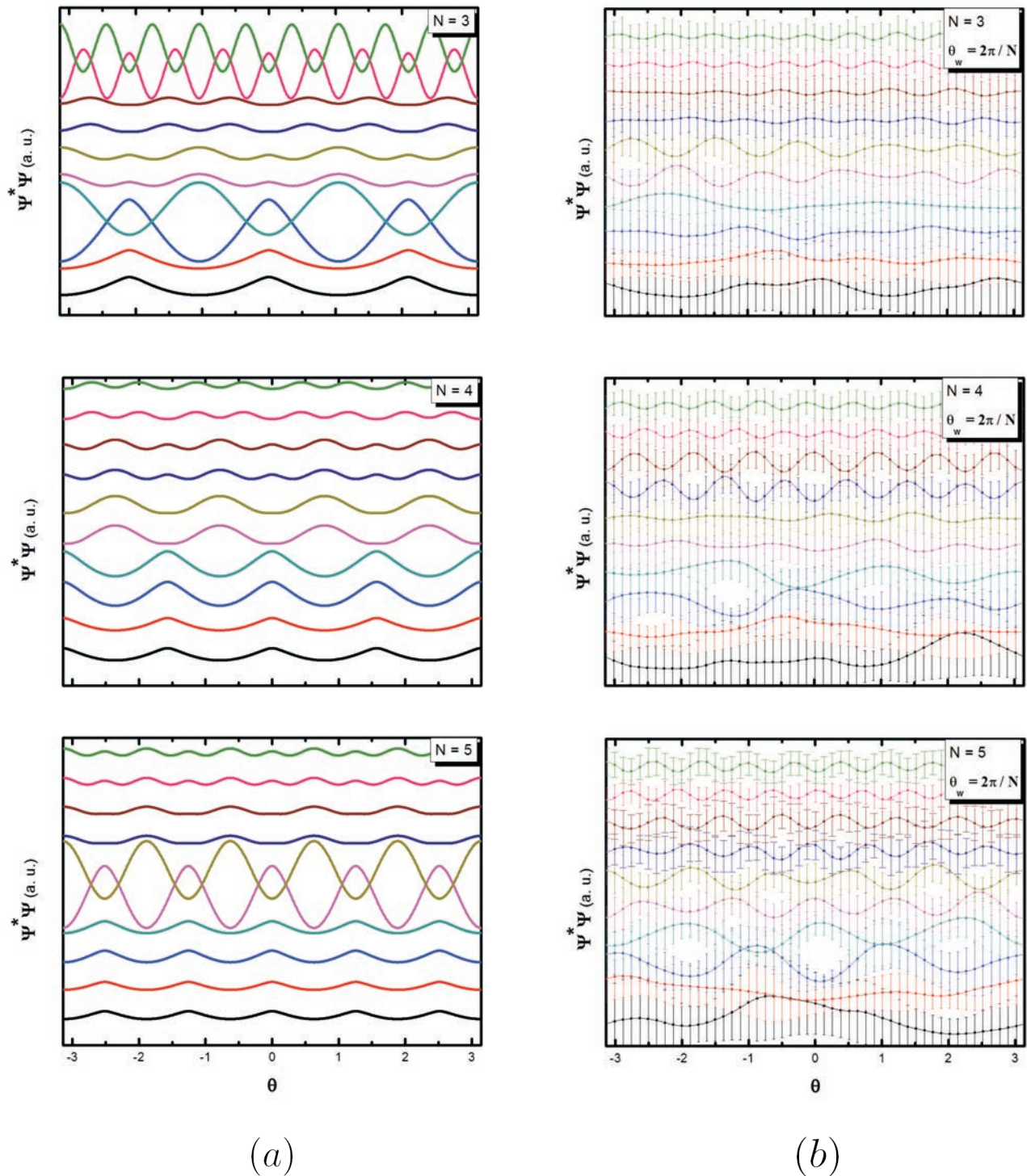


Figura 52: Módulo quadrado das funções de onda do elétron ($\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$) como função da coordenada angular θ , para os dez primeiros estados, na presença de três, quatro e cinco impurezas positivas localizadas (a) simétrica e (b) assimetricamente, de maneira aleatória com peso da aleatoriedade $w = 2\pi/N$, ao longo do anel.

Capítulo 4

Poço quântico simples e superredes em anéis quânticos ideais

Neste capítulo utilizamos o método da matriz transferência [18] para calcular os efeitos no espectro de energia de um elétron em um anel quântico ideal, com as já citadas aproximações dadas na Seção 2.1.1, devido a um potencial de confinamento adicional tipo poço quadrado ao longo da direção angular. Consideraremos os casos com apenas um poço quântico simples, quadrado finito, e também com vários poços com profundidades iguais ou aleatórias.

4.1 Modelo teórico

A utilização da transformação de *gauge* (ver Seção 2.3) na implementação do método da matriz transferência neste caso nada mais é que um artifício analítico, que facilita bastante nossos cálculos devido ao fato de podermos analisar, após a transformação, uma equação diferencial que não contém nenhuma parte imaginária:

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^*R^2} \frac{d^2}{d\theta^2} + V_{def}(R, \theta, 0) \right\} \Phi(\theta) = E\Phi(\theta). \quad (4.1)$$

Além disso, como veremos adiante, a periodicidade angular do anel implicará em uma condição de contorno periódica para a Eq. (4.1), que reduzirá bastante o número de estados obtidos no espectro de energia do anel.

O método da matriz transferência consiste em uma discretização do potencial em passos pequenos, que aqui consideraremos constantes de $\Delta\theta$, onde o valor do potencial

em cada intervalo $\theta_n < \theta < \theta_{n+1}$ também seja constante e igual a

$$V_n = V \left(\frac{\theta_{n+1} + \theta_n}{2} \right) \quad \text{ou} \quad V_n = \frac{1}{2} [V(\theta_{n+1}) + V(\theta_n)], \quad (4.2)$$

isto é, igual ao valor do potencial do centro do intervalo ou ao valor médio das extremidades do intervalo. Dessa forma, teremos uma equação de Schrödinger pra cada intervalo:

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^* R^2} \frac{d^2}{d\theta^2} + V_n(R, \theta, 0) \right\} \Phi_n(\theta) = E \Phi_n(\theta) \quad (4.3)$$

ou ainda

$$\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Phi_n(\theta) = \frac{V_n - E}{E_R} \Phi_n(\theta), \quad (4.4)$$

com

$$E_R = \frac{\hbar^2}{2m^* R^2}. \quad (4.5)$$

Como em cada intervalo o valor do potencial é constante, então o problema a ser resolvido em cada intervalo é de fato um problema simples de um potencial constante V_n , bem conhecido na literatura [15, 18, 19, 55], que tem solução do tipo:

$$\Phi_n(\theta) = A_n C[\kappa_n(\theta - \theta_n)] + B_n S[\kappa_n(\theta - \theta_n)], \quad (4.6)$$

com

$$\kappa_n = \sqrt{\frac{|V_n - E|}{E_R}}, \quad (4.7)$$

e as funções $C[\kappa_n(\theta - \theta_n)]$ e $S[\kappa_n(\theta - \theta_n)]$ são dadas por:

$$C[\kappa_n(\theta - \theta_n)] = \begin{cases} \cos[\kappa_n(\theta - \theta_n)] & \text{se } V_n < E \\ \cosh[\kappa_n(\theta - \theta_n)] & \text{se } V_n > E \end{cases} \quad (4.8)$$

e

$$S[\kappa_n(\theta - \theta_n)] = \begin{cases} \sin[\kappa_n(\theta - \theta_n)] & \text{se } V_n < E \\ \sinh[\kappa_n(\theta - \theta_n)] & \text{se } V_n > E \end{cases}. \quad (4.9)$$

Considerando dois intervalos consecutivos e aplicando as condições de continuidade da função de onda e da derivada da função de onda na fronteira desses intervalos ($\theta = \theta_{n+1}$), isto é

$$\Phi_n(\theta) \Big|_{\theta=\theta_{n+1}} = \Phi_{n+1}(\theta) \Big|_{\theta=\theta_{n+1}} \quad (4.10)$$

e

$$\frac{\partial \Phi_n(\theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\theta_{n+1}} = \frac{\partial \Phi_{n+1}(\theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\theta_{n+1}}, \quad (4.11)$$

nós obtemos a seguinte relação entre os coeficientes das funções de onda dos intervalos:

$$\begin{bmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C[\eta_n] & S[\eta_n] \\ \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}}C'[\eta_n] & \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}}C[\eta_n] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = M_n \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

onde $\eta_n = \kappa_n(\theta_{n+1} - \theta_n)$ e $C'[\eta_n] = dC[\eta_n]/d\eta_n$.

Como vemos, obteremos a cada novo passo $\Delta\theta$ uma matriz M_n (2×2) relacionando os coeficientes da presente função de onda, solução para um potencial V_n , com todas as outras matrizes anteriores relacionadas aos outros intervalos. Assim, o que teremos na verdade é o produto de matrizes relacionando os coeficientes do primeiro intervalo tomado (n) ao último requerido ($N+n+1$), com N intervalos:

$$\begin{bmatrix} A_{N+n+1} \\ B_{N+n+1} \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{i=n}^{N+n} M_i \right\} \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix}. \quad (4.13)$$

Dessa forma, se denotarmos $\theta_0 = 0$ e $\theta_{N+1} = 2\pi$ teremos os coeficientes para a função de onda em $\theta = 2\pi$ como função dos coeficientes para $\theta = 0$. Assim:

$$\begin{bmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{n=0}^N M_n \right\} \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix}, \quad (4.14)$$

onde temos usado $\kappa_{N+1} = \kappa_0$. De fato, ao relacionarmos os coeficientes de $\theta = 2\pi$ com $\theta = 0$ através da matriz que denotaremos por $M_{2\pi}$, estamos fazendo uma translação no sistema, isto é:

$$\left\{ \prod_{n=0}^N M_n \right\} = M_{2\pi}, \quad (4.15)$$

então a matriz $M_{2\pi}$ é a matriz que representa o operador translação $T_{2\pi} = \exp \left\{ i2\pi \frac{\phi}{\phi_0} \right\} = \exp \{ i\delta_\phi \}$ [15], como mostrado na Eq. (2.67). Assim, teremos para $M_{2\pi}$ os mesmos autovalores de $T_{2\pi}$, logo

$$\begin{bmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{bmatrix} = M_{2\pi} \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} = \exp \{ i\delta_\phi \} \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix}. \quad (4.16)$$

Agora, notemos que o determinante da matriz M_n :

$$\det(M_n) = \begin{vmatrix} C[\eta_n] & S[\eta_n] \\ \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}}C'[\eta_n] & \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}}C[\eta_n] \end{vmatrix}, \quad (4.17)$$

é dado por:

$$\det(M_n) = \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}} C^2[\eta_n] - \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}} S[\eta_n] C'[\eta_n]. \quad (4.18)$$

Como $C'[\eta_n] = dC[\eta_n]/d\eta_n = \pm S[\eta_n]$, no qual o sinal será mais ou menos, dependendo da definição de $C[\eta_n]$, isto é, caso $C[\eta_n] = \cos(\eta_n)$ então $C'[\eta_n] = -\sin(\eta_n)$ e caso $C[\eta_n] = \cosh(\eta_n)$ então $C'[\eta_n] = \sinh(\eta_n)$, o que está diretamente ligado ao fato de o potencial V_n ser menor ou maior que o valor da energia, temos então duas possibilidades:

- Para $V_n < E$:

Temos $C[\eta_n] = \cos(\eta_n)$ e $S[\eta_n] = \sin(\eta_n)$, logo a Eq. (4.18) fica:

$$\begin{aligned} \det(M_n) &= \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}} \cos^2[\eta_n] - \left[-\frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}} \sin^2[\eta_n] \right] \\ &= \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}} \cos^2[\eta_n] + \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}} \sin^2[\eta_n] \\ &= \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}} [\cos^2[\eta_n] + \sin^2[\eta_n]] \\ &= \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

onde utilizamos a relação fundamental da trigonometria, $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$.

- Para $V_n > E$:

Temos $C[\eta_n] = \cosh(\eta_n)$ e $S[\eta_n] = \sinh(\eta_n)$, logo a Eq. (4.18) fica:

$$\begin{aligned} \det(M_n) &= \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}} \cosh^2[\eta_n] - \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}} \sinh^2[\eta_n] \\ &= \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}} [\cosh^2[\eta_n] - \sinh^2[\eta_n]] \\ &= \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

onde utilizamos a relação trigonométrica $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$.

Portanto, vemos que independente do nível de energia o valor do determinante da matriz M_n é igual a

$$\det(M_n) = \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}}. \quad (4.21)$$

Fazendo uso dessa propriedade, considerando agora a matriz que representa a translação e utilizando a Eq. (4.15), temos que:

$$\det(M_{2\pi}) = \det \left(\prod_{n=0}^N M_n \right), \quad (4.22)$$

como $\det(A.B) = \det(A). \det(B)$, então:

$$\begin{aligned}
 \det(M_{2\pi}) &= \prod_{n=0}^N \det(M_n) \\
 &= \prod_{n=0}^N \frac{\kappa_n}{\kappa_{n+1}} \\
 &= \frac{\kappa_0}{\kappa_1} \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \frac{\kappa_2}{\kappa_3} \cdots \frac{\kappa_N}{\kappa_{N+1}} \\
 &= \frac{\kappa_0}{\kappa_{N+1}}.
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

Da condição de periodicidade $\kappa_{N+1} = \kappa_0$, temos então

$$\det(M_{2\pi}) = 1. \tag{4.24}$$

Escrevendo a equação de autovalores para a matriz que representa o operador translação $M_{2\pi}$, temos que:

$$M_{2\pi}\Phi = \lambda\Phi \tag{4.25}$$

e tomando a equação secular, sabendo que os autovalores de $M_{2\pi}$ são dados por $\exp\{i\delta_\phi\}$, obtemos que

$$\det(M_{2\pi} - e^{i\delta_\phi} I_{2x2}) = 0 \tag{4.26}$$

onde I_{2x2} é a matriz unitária 2×2 . Esta equação nos leva a uma equação implícita para as energias como função de δ_ϕ , utilizando as Eqs. (4.14) e (4.15):

$$\begin{aligned}
 \begin{vmatrix} m_{11} - e^{i\delta_\phi} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} - e^{i\delta_\phi} \end{vmatrix} &= (m_{11} - e^{i\delta_\phi})(m_{22} - e^{i\delta_\phi}) - m_{21}m_{12} \\
 &= m_{11}m_{22} - m_{21}m_{12} - e^{i\delta_\phi}(m_{11} + m_{22}) \\
 &= \det(M_{2\pi}) - e^{i\delta_\phi}(m_{11} + m_{22}) + e^{i2\delta_\phi} \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{4.27}$$

e pela Eq. (4.24), temos que:

$$1 - e^{i\delta_\phi}(m_{11} + m_{22}) + e^{i2\delta_\phi} = 0. \tag{4.28}$$

Reescrevendo a Eq. (4.28), utilizando a forma exponencial de Euler, obtemos:

$$1 + \cos(2\delta_\phi) - \cos(\delta_\phi)(m_{11} + m_{22}) + i [\sin(2\delta_\phi) - \sin(\delta_\phi)(m_{11} + m_{22})] = 0. \tag{4.29}$$

Nesta expressão, vemos que as partes real e imaginária devem ser zero. Assim, da

parte imaginária temos

$$m_{11} + m_{22} = 2 \cos(\delta_\phi), \quad (4.30)$$

onde utilizamos a relação trigonométrica $\sin(2x) = 2 \cos(x) \sin(x)$.

A Eq. (4.30) demonstra que o espectro de energia é periódico como função da razão ϕ/ϕ_0 , conforme comentado no Capítulo 3, sendo esta a condição de periodicidade que utilizaremos para encontrar o espectro de energia do anel com poços e superredes. Vale ressaltar ainda que o método descrito acima é bem geral e pode ser utilizado para resolver numericamente problemas de anéis com campo magnético sob influência de qualquer perturbação.

4.2 Poços quânticos simples

Consideraremos agora a presença de um poço quântico simples ao longo da direção angular em um anel quântico unidimensional com campo magnético, cujo potencial é dado por

$$V_{QW}(\theta) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } 0 < \theta < \theta_W \\ 0 & \text{se } \theta_W < \theta < 2\pi \end{cases} \quad (4.31)$$

para uma largura angular θ_W , considerando a largura da barreira $\theta_B = 2\pi - \theta_W$ e a

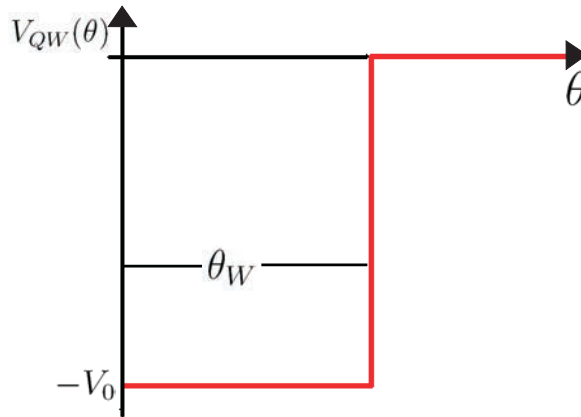


Figura 53: Poço de potencial de largura θ_W e profundidade V_0 ao longo da direção angular do anel.

profundidade $-V_0$ com $V_0 > 0$. Tal potencial está ilustrado na Figura 53.

Utilizando o método da matriz transferência descrito na seção anterior, em especial a

Eq. (4.30), e definindo as constantes abaixo:

$$k_W = \sqrt{\frac{E + V_0}{E_R}}, \quad (4.32a)$$

$$\kappa_B = \sqrt{\frac{-E}{E_R}}, \quad (4.32b)$$

$$k_B = \sqrt{\frac{E}{E_R}}, \quad (4.32c)$$

onde $\kappa_B = ik_B$, nós encontraremos que as autoenergias do poço quântico no anel são soluções das seguintes equações transcendentais:

$$\begin{cases} \cos(\theta_B k_B) \cos(\theta_W k_W) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_B}{k_W} + \frac{k_W}{k_B} \right) \sin(\theta_B k_B) \sin(\theta_W k_W) = \cos(\delta_\phi), & E > 0 \\ \cosh(\theta_B \kappa_B) \cos(\theta_W k_W) + \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa_B}{k_W} - \frac{k_W}{\kappa_B} \right) \sinh(\theta_B \kappa_B) \sin(\theta_W k_W) = \cos(\delta_\phi), & E < 0 \end{cases} \quad (4.33)$$

4.3 Superredes

4.3.1 Com profundidades iguais

Consideremos agora o caso de superredes ao longo da direção angular. A estrutura dos potenciais de poços quânticos é dada por

$$V_{SL}(\theta) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } p\theta_D < \theta < p\theta_D + \theta_W \\ 0 & \text{se } p\theta_D + \theta_W < \theta < (p+1)\theta_D \end{cases}, \quad (4.34)$$

sendo $p = 0, 1, 2, \dots, N - 1$, onde N é o número de períodos, isto é, o número de poços que formam a superrede, tal que $N = 1$ corresponde o caso anterior de apenas um poço quântico simples e θ_D é a periodicidade angular da superrede, definida como

$$\theta_D = \frac{2\pi}{N} \equiv \theta_W + \theta_B. \quad (4.35)$$

As superredes consideradas nesse trabalho serão sempre construídas tais que as larguras angulares dos poços sejam todas iguais, com o mesmo valor θ_W , como definido na Eq. (4.34). Representamos duas superredes com dois e três poços na Figura 54. Mostramos

na Figura 54(a) o esboço de duas superredes com $N = 2$ e $N = 3$ poços. Como vemos, construímos as superredes ajustando os poços de maneira simétrica e equidistante, já que assumimos θ_W e θ_B iguais para cada poço ao longo da superrede. Como podemos ver na Figura 54(b) e pela Eq. (4.34), para uma dada superrede com N poços teremos $2N$ camadas, compostas por N poços e N barreiras, e $2N$ interfaces posicionadas nos seguintes valores de θ :

$$\theta_i = \begin{cases} \frac{(i-1)}{2}\theta_D + \theta_W & \text{se } i \text{ for ímpar} \\ \frac{i}{2}\theta_D & \text{se } i \text{ for par} \end{cases}. \quad (4.36)$$

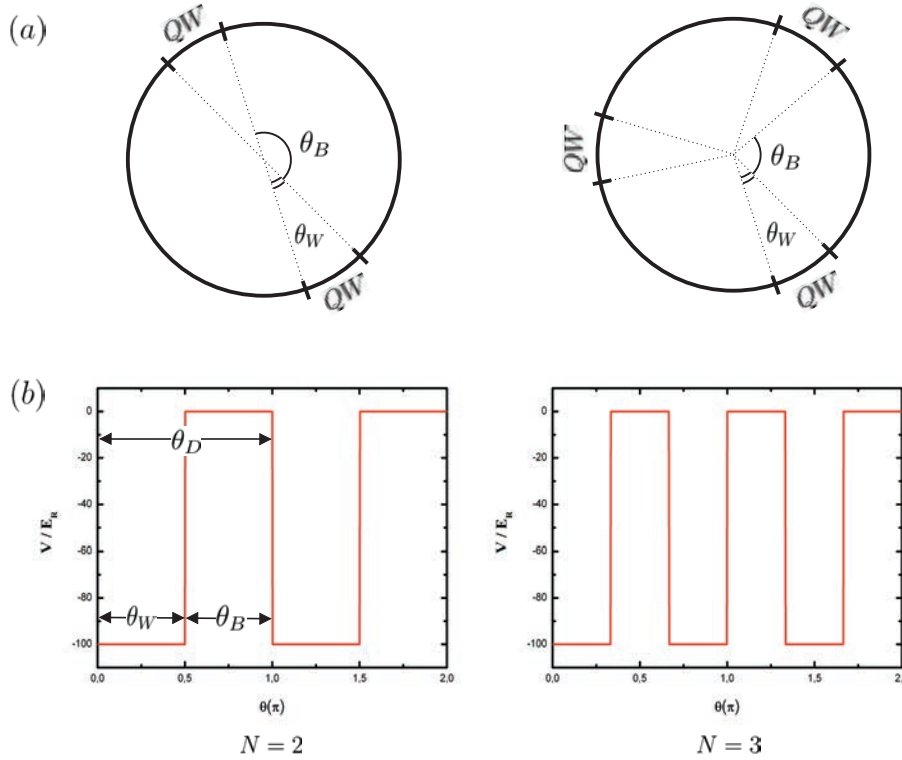


Figura 54: (a) Esboço de duas superredes com $N = 2$ e $N = 3$ poços de potenciais quânticos simples na direção angular do anel. (b) Potenciais das superredes com $N = 2$ e $N = 3$ poços, para o caso em que $V_0 = 100E_R$.

O Hamiltoniano efetivo para a superrede é:

$$H_{eff} = \frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \left\{ -i \frac{d}{d\theta} + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 + V_{SL}(\theta). \quad (4.37)$$

Da periodicidade do potencial da superrede, obtemos

$$V_{SL}(\theta + l\theta_D) = V_{SL}(\theta), \quad (4.38)$$

onde utilizamos a periodicidade angular dada por θ_D e l como sendo qualquer inteiro.

Lembrando do operador translação comentado na Seção 2.3.1 temos que:

$$T_{\theta_D} \Psi(\theta) = \Psi(\theta + \theta_D), \quad (4.39)$$

e de maneira geral

$$T_{l\theta_D} \Psi(\theta) = \Psi(\theta + l\theta_D), \quad (4.40)$$

com $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

Segue também da periodicidade angular que

$$[T_{l\theta_D}, H_{eff}] = 0, \quad (4.41)$$

então podemos construir uma base de autovetores em comum de H_{eff} e $T_{l\theta_D}$ tal que:

$$\begin{cases} T_{l\theta_D} \Psi = \tau(l\theta_D) \Psi \\ H_{eff} \Psi = E \Psi \end{cases}. \quad (4.42)$$

Daí temos:

$$T_{l\theta_D} T_{m\theta_D} \Psi = \Psi(\theta + l\theta_D + m\theta_D) = T_{(l+m)\theta_D} \Psi, \quad (4.43)$$

portanto $T_{l\theta_D} T_{m\theta_D} = T_{(l+m)\theta_D}$. Aplicando no autovetor, obtemos que

$$T_{l\theta_D} T_{m\theta_D} \Psi = T_{(l+m)\theta_D} \Psi \rightarrow \tau(l\theta_D) \tau(m\theta_D) = \tau(l\theta_D + m\theta_D). \quad (4.44)$$

Reescrevendo $x = l\theta_D$ e $y = m\theta_D$ e aplicando a derivada:

$$\begin{aligned} \tau(x)\tau(y) &= \tau(x+y) \\ \frac{\partial}{\partial x} (\tau(x)\tau(y)) &= \frac{\partial}{\partial x} (\tau(x+y)) \rightarrow \tau'(x)\tau(y) = \tau'(x+y) \cdot \\ \frac{\partial}{\partial y} (\tau(x)\tau(y)) &= \frac{\partial}{\partial y} (\tau(x+y)) \rightarrow \tau(x)\tau'(y) = \tau'(x+y) \end{aligned} \quad (4.45)$$

Comparando estas três equações, temos que

$$\tau(x)\tau'(y) = \tau'(x)\tau(y) \quad (4.46)$$

e

$$\frac{\tau'(x)}{\tau(x)} = \frac{\tau'(y)}{\tau(y)} = ik = \text{constante}, \quad (4.47)$$

onde $k \in \mathbb{C}$ à priori. Daí

$$\tau'(x) = ik\tau(x) \rightarrow \tau(x) = Ae^{ikx}, \quad (4.48)$$

e como $\tau(x)\tau(y) = \tau(x+y)$, podemos encontrar A :

$$A^2 e^{ikx} e^{iky} = A e^{ik(x+y)} \rightarrow A^2 e^{ik(x+y)} = A e^{ik(x+y)} \rightarrow A^2 = A \rightarrow A = 1. \quad (4.49)$$

Obtemos portanto, com as Eqs. (4.48) e (4.49), $\tau(l\theta_D) = e^{ikl\theta_D}$ e assim, das Eqs. (4.40) e (4.42), temos que

$$\Psi(\theta + l\theta_D) = e^{ikl\theta_D} \Psi(\theta), \quad (4.50)$$

o que é bastante coerente pois $e^{ik\Delta\theta}$ é o operador de rotação sobre um ângulo $\Delta\theta$.

Para descobrir o valor de k vamos utilizar a condição de periodicidade da função de onda

$$\Psi(\theta + 2\pi) = \Psi(\theta) \quad (4.51)$$

e

$$\Psi(\theta + l\theta_D) = \Psi(\theta). \quad (4.52)$$

Fazendo uso da Eq. (4.50), temos que:

$$\Psi(\theta + l\theta_D) = e^{ikl\theta_D} \Psi(\theta) = \Psi(\theta) \rightarrow e^{ikl\theta_D} = 1, \quad (4.53)$$

e

$$e^{ik2\pi} = 1, \quad (4.54)$$

daí obtemos, da mesma forma como no final da Seção 2.2, que k assume valores inteiros. Aplicando a transformação de *gauge* dada na Seção 2.3.1 pela Eq. (2.62) na equação de autovalor para o Hamiltoniano efetivo com o potencial da superrede chegamos à forma

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^* R^2} \frac{d^2}{d\theta^2} + V_{SL}(\theta) \right\} \Phi(\theta) = E\Phi(\theta). \quad (4.55)$$

Usando a condição de periodicidade da função de onda para superredes, dada pela Eq. (4.50), e substituindo a transformação de *gauge* dada pela Eq. (2.62), obtemos que

$$\Psi(\theta + \theta_D) = \Phi(\theta) e^{\left\{-i\frac{\phi}{\phi_0}\theta\right\}} e^{\{ik\theta_D\}} \quad (4.56)$$

e

$$\Psi(\theta + \theta_D) = \Phi(\theta + \theta_D) e^{\left\{-i\frac{\phi}{\phi_0}(\theta + \theta_D)\right\}}. \quad (4.57)$$

Comparando estas duas equações observamos que a nova condição de periodicidade

da função passa a ser dada por

$$\Phi(\theta + \theta_D) = \Phi(\theta) e^{\left\{ i \left(k + \frac{\phi}{\phi_0} \right) \theta_D \right\}}. \quad (4.58)$$

Utilizando o método da matriz transferência, a condição de continuidade Eq. (4.30) e as Eqs. (4.32a), (4.32b) e (4.32c), podemos mostrar que as autoenergias da superrede no anel são soluções das seguintes equações transcendentais:

$$\begin{cases} \cos(\theta_B k_B) \cos(\theta_W k_W) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_B}{k_W} + \frac{k_W}{k_B} \right) \sin(\theta_B k_B) \sin(\theta_W k_W) = \cos \left[\left(k + \frac{\phi}{\phi_0} \right) \theta_D \right], & E > 0 \\ \cosh(\theta_B \kappa_B) \cos(\theta_W k_W) + \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa_B}{k_W} - \frac{k_W}{\kappa_B} \right) \sinh(\theta_B \kappa_B) \sin(\theta_W k_W) = \cos \left[\left(k + \frac{\phi}{\phi_0} \right) \theta_D \right], & E < 0 \end{cases} \quad (4.59)$$

4.3.2 Com profundidades aleatórias

A grande motivação para analisarmos o caso aqui tratado de uma superrede com poços de profundidades aleatórias é compará-lo com a estrutura de um anel com a superfície rugosa [31], verificando as possíveis similaridades nessas construções. Tal comparação será realizada na Seção 5.3, quando abordarmos o problema da rugosidade no anel quântico.

Na construção da superrede com poços com profundidades aleatórias utilizamos a subrotina *rand48* [70] como geradora dos números aleatórios, onde precisamos entrar com três valores inteiros que são as sementes da subrotina. Usando as mesmas sementes em execuções diferentes obteremos a mesma sequência de números aleatórios. A escolha das sementes de entrada é arbitrária. Na Figura 55 mostraremos os cem primeiros números aleatórios da sequência gerada com o uso das seguintes sementes

$$\text{seed}(1) = -37 \quad \text{seed}(2) = 0 \quad \text{seed}(3) = 23. \quad (4.60)$$

Fazendo uso dessa sequência de números aleatórios, construímos o potencial da superrede por

$$V_{SL}(\theta) = \begin{cases} -V_0 \cdot \text{nrnd}(p) & \text{se } p\theta_D < \theta < p\theta_D + \theta_W \\ 0 & \text{se } p\theta_D + \theta_W < \theta < (p+1)\theta_D \end{cases} \quad (4.61)$$

sendo $p = 0, 1, 2, \dots, N - 1$, e $\text{nrnd}(p)$ o p -ésimo número aleatório.

Ilustramos na Figura 56 o potencial de uma superrede com profundidades aleatórias

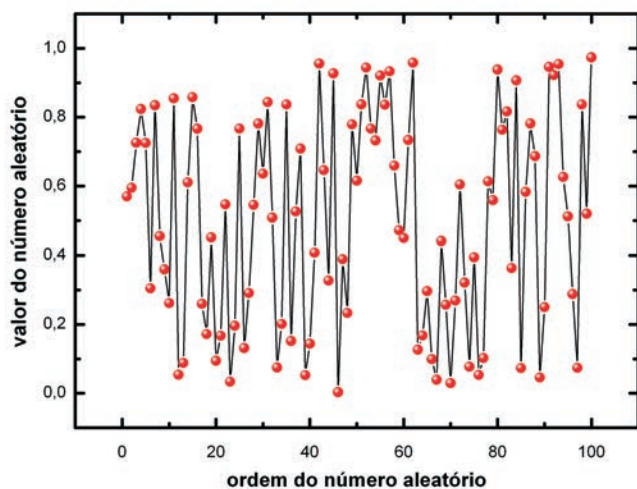


Figura 55: Os cem primeiros números aleatórios gerados com as sementes inteiras -37, 0 e 23.

formada com dez poços, tendo os poços uma largura angular fixa de valor $\theta_W = \theta_B = \theta_D/2$ e com $\theta_D = 2\pi/N$.

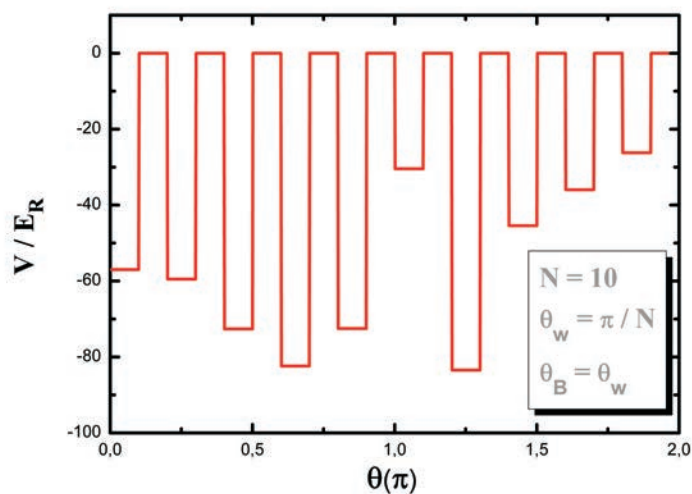


Figura 56: Superrede de poços de potencial com profundidades aleatórias, formada assumindo $\theta_W = \theta_B = \theta_D/2$ e $\theta_D = 2\pi/N$.

4.4 Resultados e discussões

Utilizamos as equações transcendentais para o poços e superredes, Eqs. (4.33) e (4.59), para encontrarmos as autoenergias tanto para o poço simples como para superredes no anel quântico com profundidades iguais. Para as superredes com profundidades aleatórias faremos uso de uma solução inteiramente numérica. Estas energias correspondem

aos zeros das equações transcendentais. No caso do poço quântico simples, na ausência de campo magnético, mostraremos a relação das autoenergias com a profundidade do poço analisando o número de estados ligados e também a variação das energias com a largura angular do poço para uma profundidade fixa do potencial. No caso da superrede, encontramos o espectro de energia na ausência de campo magnético e analisamos o comportamento das minibandas formadas pelos estados ligados com relação ao confinamento do potencial. Considerando a influência do campo magnético analisaremos os seus efeitos sobre o espectro de energia do poço e da superrede no anel.

4.4.1 Poços quânticos simples

Mostraremos aqui o comportamento do espectro de energia na ausência ou não de campo magnético:

- **Na ausência de campo magnético:**

Tomando as larguras do poço e da barreira constantes de valores $\theta_W = \theta_B = \pi$ temos uma relação das autoenergias com a profundidade do poço mostrada na Figura 57.

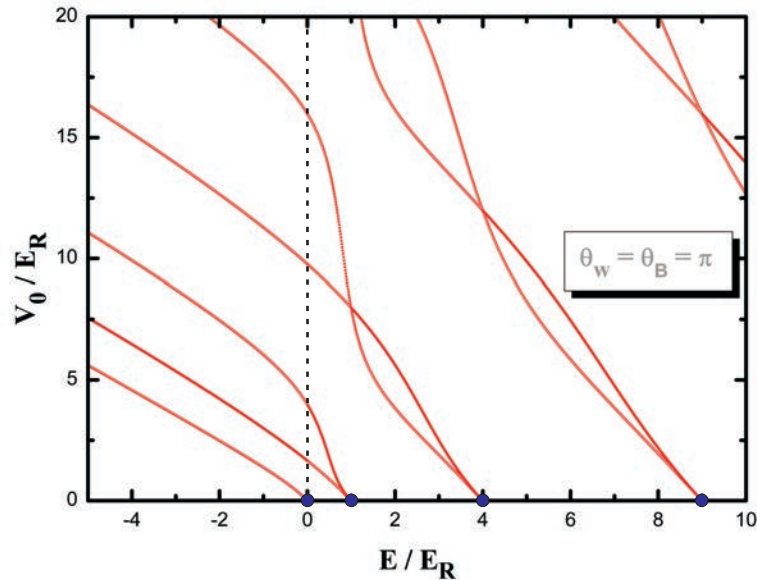


Figura 57: Variação das autoenergias como função da profundidade do poço de potencial quadrado simples.

Analisando a Figura 57 podemos perceber que quando o potencial for nulo, $V_0/E_R = 0$, recuperamos a solução para o anel quântico 1D, representada pelos círculos azuis, onde

os valores das autoenergias são

$$E = \frac{\hbar^2 n^2}{2m^* R^2} \quad (4.62)$$

com $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, como na Eq. (2.53) ao fazermos $B = 0$, isto é, ao fazermos $\phi/\phi_0 = 0$. Tal afirmação também pode ser verificada ao compararmos os círculos na Figura 57 com os valores de campo nulo na Figura 34. Vemos na Figura 57 que a energia mínima de E/E_R não pode ser de fato menor que o mínimo do potencial $-V_0$, isto é, deve ser estabelecida a seguinte inequação:

$$E_{min} \geq -V_0. \quad (4.63)$$

Isto implica que se traçarmos a reta $V_0 = -E$ na Figura 57 não podemos ter nenhum estado abaixo da reta.

Podemos perceber também que para poços fracamente atrativos, isto é, quando $V_0 \rightarrow 0$, existe apenas um estado ligado, o que se deve ao fato da natureza unidimensional do problema, como pode ser visto na referência [73]. Quando a profundidade do potencial aumenta, cresce também o número de estados ligados, e o número de estados ligados é dado pelo número de soluções da equação Eq. (4.33) quando fazemos $E = 0$

$$\cos(\theta_B k_B) \cos(\theta_W k_W) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_B}{k_W} + \frac{k_W}{k_B} \right) \sin(\theta_B k_B) \sin(\theta_W k_W) = \cos(\delta_\phi), \quad (4.64)$$

tendo assim:

$$k_W = \sqrt{\frac{E + V_0}{E_R}} \xrightarrow{E=0} k_W = \sqrt{\frac{V_0}{E_R}}, \quad (4.65)$$

e

$$k_B = \sqrt{\frac{E}{E_R}} \xrightarrow{E=0} k_B = 0. \quad (4.66)$$

Pelo limite fundamental,

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin(x)}{x} = 1, \quad (4.67)$$

obtemos

$$\lim_{E \rightarrow 0} \frac{\sin(\theta_B k_B)}{k_B} = \lim_{E \rightarrow 0} \frac{\theta_B \sin(\theta_B k_B)}{\theta_B k_B} = \theta_B. \quad (4.68)$$

Daí, substituindo os resultados das Eqs. (4.65), (4.66) e (4.68), na Eq. (4.64), encontramos

$$\cos \left(\theta_W \sqrt{\frac{V_0}{E_R}} \right) - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}} \theta_B \sin \left(\theta_W \sqrt{\frac{V_0}{E_R}} \right) = \cos(\delta_\phi), \quad (4.69)$$

e fazendo $u = \theta_W \sqrt{\frac{V_0}{E_R}}$, obtemos uma equação cujo o número de soluções é o número de estados ligados, e que os valores das profundidades do potencial ($V < V_0$) para que um

estado torne-se ligado satisfazem a equação dada por

$$\cos(u) - \frac{\theta_B}{2\theta_W} u \sin(u) = \cos(\delta_\phi), \quad (4.70)$$

isto é, o número de raízes da Eq. (4.70) para valores das profundidades do potencial com $V < V_0$ é o número de autoestados para um valor de E fixo.

Na ausência de campo magnético, isto é, quando $B = 0 \rightarrow \delta_\phi = 0 \rightarrow \cos(\delta_\phi) = 1$, temos que as soluções para a Eq. (4.70) são $u_n = 2n\pi$, com $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

Com relação aos estados excitados, podemos ver que a presença do poço quântico no anel quântico 1D faz surgir degenerescências angulares adicionais além das já existentes provindas das soluções do anel quântico 1D sem interação, de forma que estes pontos de degenerescência ocorrem exatamente com as mesmas energias que os estados do anel sem interação. Em outras palavras, a degenerescência dos estados excitados é quebrada quando aumentamos V_0 , mas eventualmente esta degenerescência volta para valores específicos de V_0 , com a mesma energia.

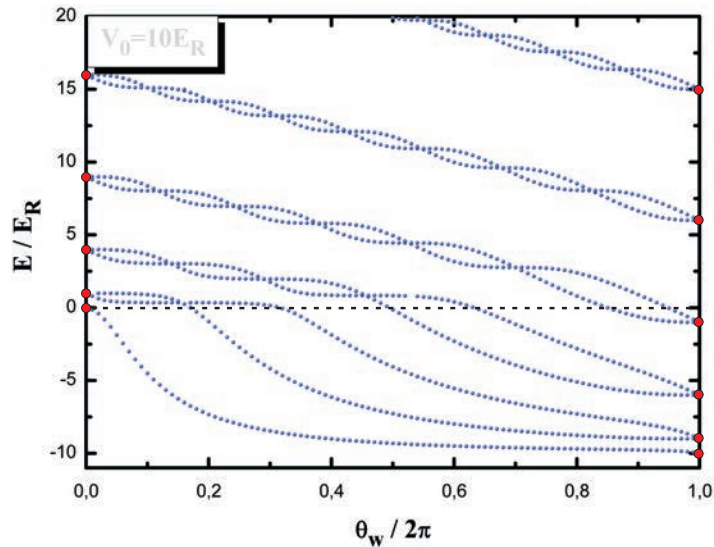


Figura 58: Variação das energias com a largura angular do poço sem campo magnético com uma profundidade do potencial fixa e de valor $V_0 = 10E_R$.

Na Figura 58 mostramos a variação das energias com respeito à largura angular do poço quântico simples para uma profundidade do potencial fixa $V_0 = 10E_R$ e sem a influência de campo magnético. Como esperado, as soluções para ambas as larguras angulares $\theta_W = 0$ e $\theta_W = 2\pi$ são as mesmas que para um anel quântico unidimensional ideal, isto é, aquelas dadas pela Eq. (4.62), sendo que para o segundo caso, em que

$\theta_W = 2\pi$, as soluções são deslocadas de $-V_0$ do valor do caso para $\theta_W = 0$, como mostrado pelos círculos vermelhos na Figura 58. Isso já era esperado, pois ao fazermos $\theta_W = 0$ teremos um potencial nulo, isto é, $V(\theta) = 0$ para qualquer valor de θ , e para $\theta_W = 2\pi$ teremos um potencial também constante, mas agora de valor $V(\theta) = -V_0$ para qualquer valor de θ . Assim, em ambos os casos não teremos mais a presença de um poço quântico. Analogamente ao que já tínhamos concluído na Figura 57, na Figura 58 vemos que os estados excitados apresentam uma degenerescência angular para valores específicos de θ_W .

- **Na presença de campo magnético:**

Consideraremos agora o efeito do campo magnético no espectro de energia do poço na estrutura do anel como representado na Figura 59.

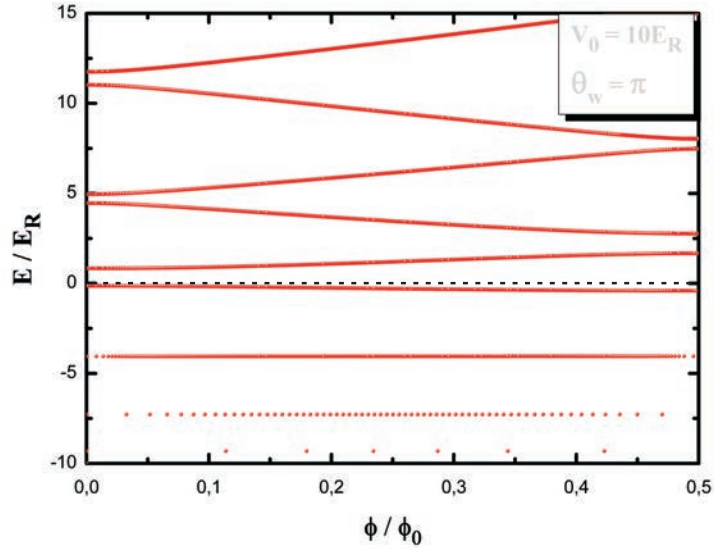


Figura 59: Influência do campo magnético sobre o espectro de energia do poço no anel.

Como a equação implícita Eq. (4.33) para as energias tem como único termo envolvendo o campo magnético a parte $\cos(\delta_\phi)$, para a construção da Figura 59 podemos nos limitar apenas à análise do intervalo $0 < \phi/\phi_0 < 1/2$, já que

$$-1 \leq \cos(\delta_\phi) \leq 1, \quad (4.71)$$

e, como $\delta_\phi = 2\pi \frac{\phi}{\phi_0}$,

$$0 \leq 2\pi \frac{\phi}{\phi_0} \leq \pi, \quad (4.72)$$

portanto

$$0 \leq \frac{\phi}{\phi_0} \leq \frac{1}{2}. \quad (4.73)$$

Analisando o comportamento da variação das energias com o fluxo magnético nesse intervalo, podemos ver que os estados ligados são apenas ligeiramente afetados pelo campo magnético, permanecendo todos os estados ligados praticamente constantes com a variação do fluxo magnético, enquanto os estados deslocalizados apresentam um comportamento oscilatório que lembra o efeito Aharonov-Bohm de um anel quântico ideal, exceto pelo fato de o cruzamento no meio-fluxo ser substituído pelo anti-cruzamento, cuja amplitude diminui com o aumento da energia. Isso já era esperado, pelo fato de que para energias muito maiores que o valor da profundidade do potencial do poço quântico ($E \gg V_0$), os estados são fracamente afetados pelo poço, fazendo com que o efeito oscilatório apareça, enquanto as energias na ordem da profundidade do poço são mais localizadas, devido a um forte aprisionamento, mantendo os estados sem qualquer oscilação.

4.4.2 Superredes

Nesta seção, consideramos dois casos na formação da superrede do anel, sendo eles com poços de profundidades iguais e previamente definidos e no outro caso, com profundidades aleatórias.

4.4.2.1 Com profundidades iguais

Mostramos aqui o comportamento do espectro de energia na ausência ou não de campo magnético para uma superrede formada com poços de profundidades iguais:

- **Na ausência de campo magnético:**

Na Figura 60, analisamos o espectro de energia sem campo magnético para as estruturas com $N = 6$ e $N = 9$ períodos. Apenas valores inteiros de k correspondem aos estados reais para superrede, devido à condição de contorno das Eqs. (4.53) e (4.54). Porém, na Figura 60 mostramos todas as curvas das bandas de energia, de onde apenas os resultados para k inteiro são estados válidos. Podemos também verificar a partir da Figura 60 a correspondência

$$E(k) = E(N - k) \quad (4.74)$$

com N sendo o número de períodos. Portanto, podemos reduzir sem perda de generalidade o intervalo de k quando N for par para o intervalo $[-N/2, N/2]$, como mostrado na Figura 61(a), que ilustra o espectro de energia no esquema de zona reduzida para $N = 10$ poços.

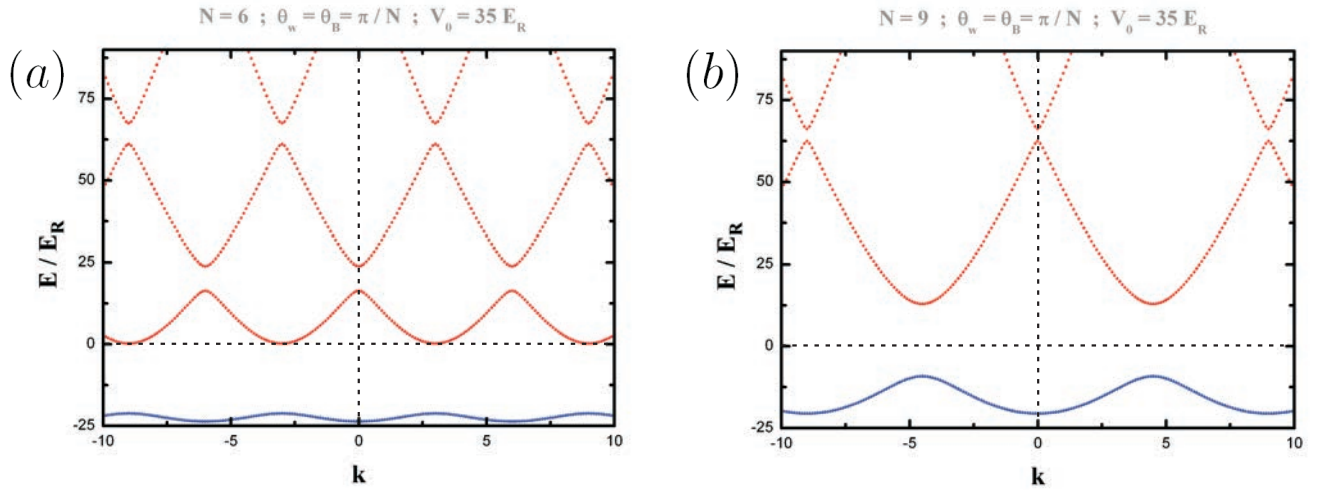


Figura 60: Relação de dispersão para (a) seis e (b) nove poços sem campo magnético com $\theta_W = \theta_B = \pi/N$ e $V_0 = 35E_R$.

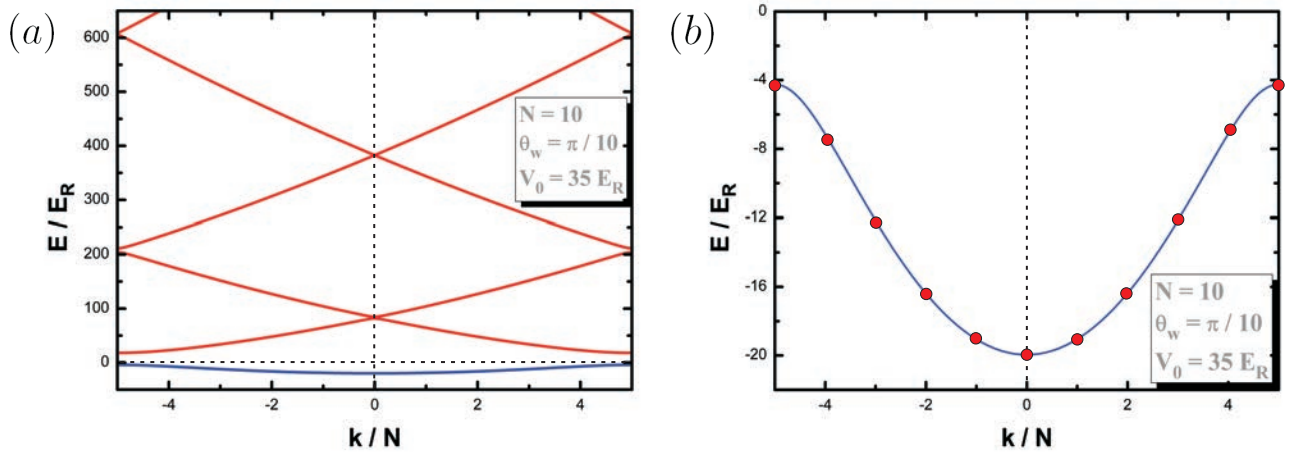


Figura 61: (a) Relação de dispersão para dez poços sem campo magnético no esquema de zona reduzida com $\theta_W = \pi/N$ e $V_0 = 35E_R$; (b) Banda ligada da relação de dispersão mostrada separadamente com os círculos vermelhos representando apenas os valores inteiros de k .

Na Figura 61(b) mostramos separadamente a dispersão da banda ligada. Como tomamos $N = 10$, temos que a banda ligada possui $\frac{N}{2} + 1 = 6$ estados ligados sendo $\frac{N}{2}$ estados duplamente degenerados, como mostrado nos círculos vermelhos. Vemos com mais detalhes esse fato na Figura 62, em que na verdade o número de estados ligados dependerá da profundidade dos poços de potencial e que o valor $\frac{N}{2} + 1$ é o número máximo de estados ligados para uma superrede com N poços.

Ainda na ausência de campo magnético, verificamos os estados ligados da superrede com relação à variação das profundidades dos poços de potenciais, e o que obtemos está

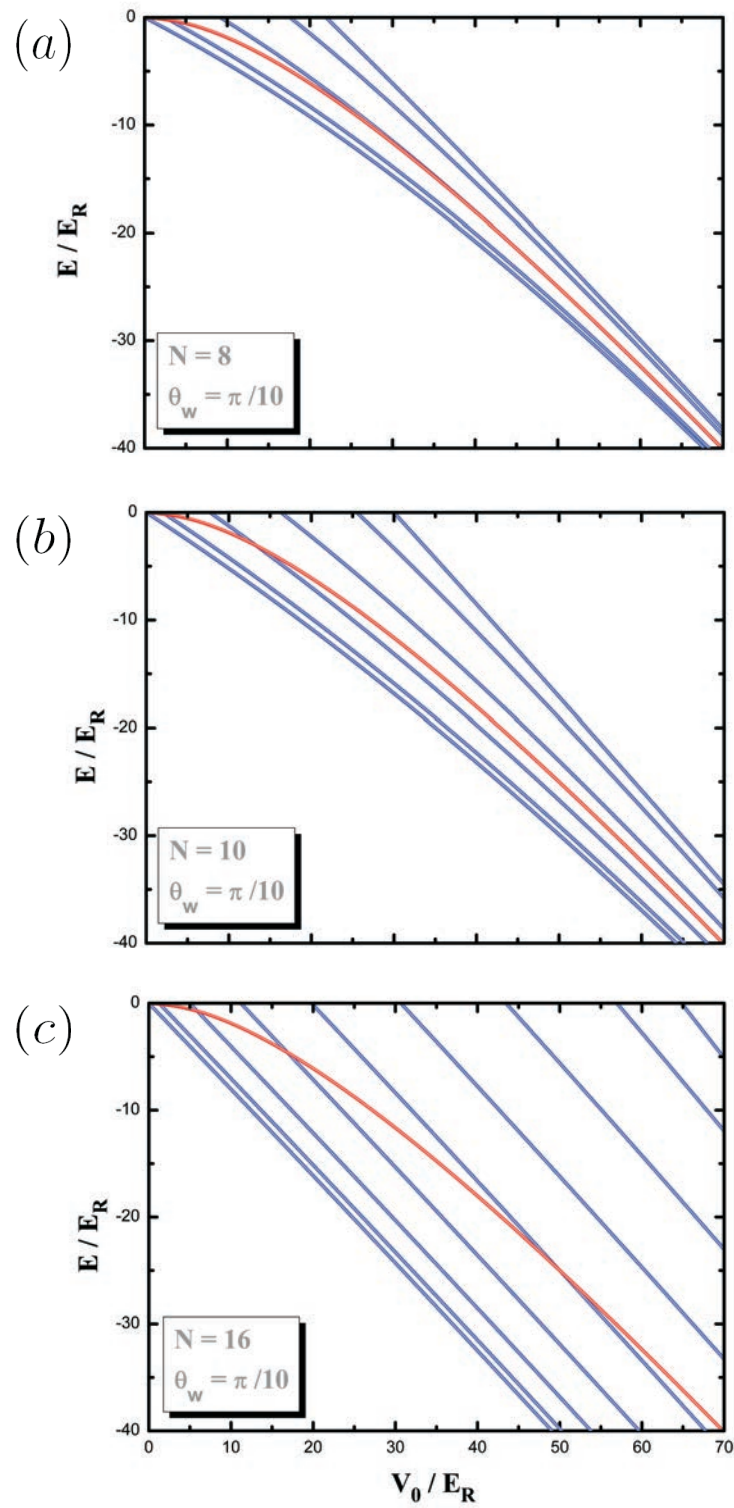


Figura 62: Comportamento dos estados ligados com relação ao confinamento do potencial para (a) oito, (b) dez e (c) dezesseis poços com $\theta_W = \pi/10$. A curva central com cor vermelha representa a solução para um poço quântico simples com a mesma largura angular $\theta_W = \pi/10$.

mostrado nas Figuras 62 (a), (b) e (c) para $N = 8$, $N = 10$ e $N = 16$ poços respectivamente. Na Figura 62 podemos facilmente ver que a largura da “minibanda” formada pelos estados ligados varia muito rapidamente com o potencial de confinamento. Para os três resultados mostrados, utilizamos poços com larguras angulares fixas, isto é, com θ_D iguais, e variamos o número de poços, o que conseqüentemente implica na variação da largura angular da barreira, de acordo com a Eq. (4.35).

Observamos também que a largura da minibanda aumenta quando a largura da barreira diminui, isto é, quando aumenta o número de poços na superrede para uma largura fixa do poço. O que está acontecendo é que, ao mantermos fixa a largura angular dos poços e ao aumentarmos o número de poços, estamos aproximando-os cada vez mais. Dessa forma os estados tendem a ficar mais separados, como já esperado, pois o mesmo acontece no caso em que aproximamos dois ou mais átomos, ou mesmo na solução da equação de Schrödinger unidimensional em que aproximamos poços de potenciais, como descrito no modelo unidimensional de Kronig-Penney para função potencial periódica, usado para representar redes cristalina simples unidimensionais [74, 75, 76, 77], como discutido na Seção 1.2.6. Mostramos também na curva central com a cor vermelha na Figura 62 a solução para um poço quântico simples com a mesma largura $\theta_W = \pi/10$. Como podemos ver, os estados da superrede são localizados ao redor da solução para o poço simples. Esse resultado é análogo à quebra da degenerescência pelo acoplamento devido ao tunelamento entre os poços vizinhos da superrede no modelo de Kronig-Penney, onde ao aproximarmos poços iguais, cada estado, igual para todos os poços, será agora relocado em torno da solução para só um poço, formando os N estados uma banda de energia na superrede no que era antes apenas uma energia para um poço simples.

Na Figura 63 mostramos ambos os estados ligados ou não para a superrede como função do potencial de confinamento, sendo agora, diferentemente do apresentado na Figura 62, a origem da energia, isto é, a linha de referência da energia, tomada no fundo dos poços na construção do potencial. Portanto, no potencial, as regiões que apresentavam valor $-V_0$ passaram a receber zero e as regiões com o valor zero passaram para V_0 . Fizemos tal alteração no sistema de referência pois apresentamos tais resultados na escala logarítmica para visualizar melhor o comportamento das energias dos estados ligados tendendo ao valor do resultado para poço quântico simples quando $V_0 \rightarrow \infty$, representado pela linha sólida com cor azul. O mesmo comportamento é observado na Figura 62. No limite oposto, de um potencial muito fraco, recuperamos assintoticamente a solução de um anel quântico ideal, $E/E_R = N^2$, como visto na reta verde pontilhada.

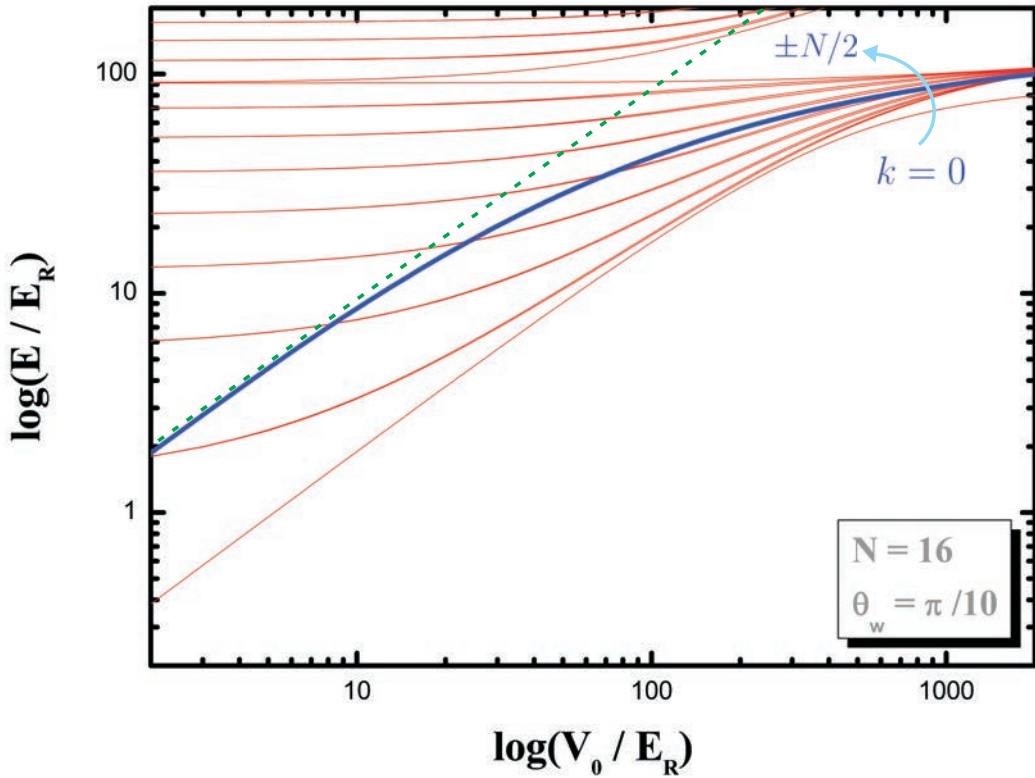


Figura 63: Comportamento dos estados de energia com relação à profundidade do potencial para dezesseis poços, sendo o ponto de referência para as energias tomado no fundo dos poços. A curva central em cor azul representa a solução para um poço quântico simples com a mesma largura angular $\theta_w = \pi/10$. A linha pontilhada em cor verde representa a solução para o anel quântico ideal $E/E_R = n^2$. A seta em cor azul mostra a diminuição da largura da minibanda quando $V_0 \rightarrow \infty$ para os $N/2 + 1$ estados.

- **Na presença de campo magnético:**

Consideramos agora os efeitos do campo magnético perpendicular ao plano do anel no espectro de energia da superrede no anel quântico. A Figura 64 ilustra a evolução com o fluxo magnético dos níveis de energia para uma superrede formada com $N = 3, 4$ e 5 poços.

Analisando da mesma forma como fizemos na Eq. (4.74), vemos aqui também que é válida a expressão

$$E(k, \phi) = E(N - k, -\phi). \quad (4.75)$$

Comparando os resultados da influência do campo magnético no espectro de energia para poços, Figura 59, e superredes, Figura 64, podemos ver que os estados ligados para uma superrede são mais sensíveis às variações do fluxo magnético do que as de poços

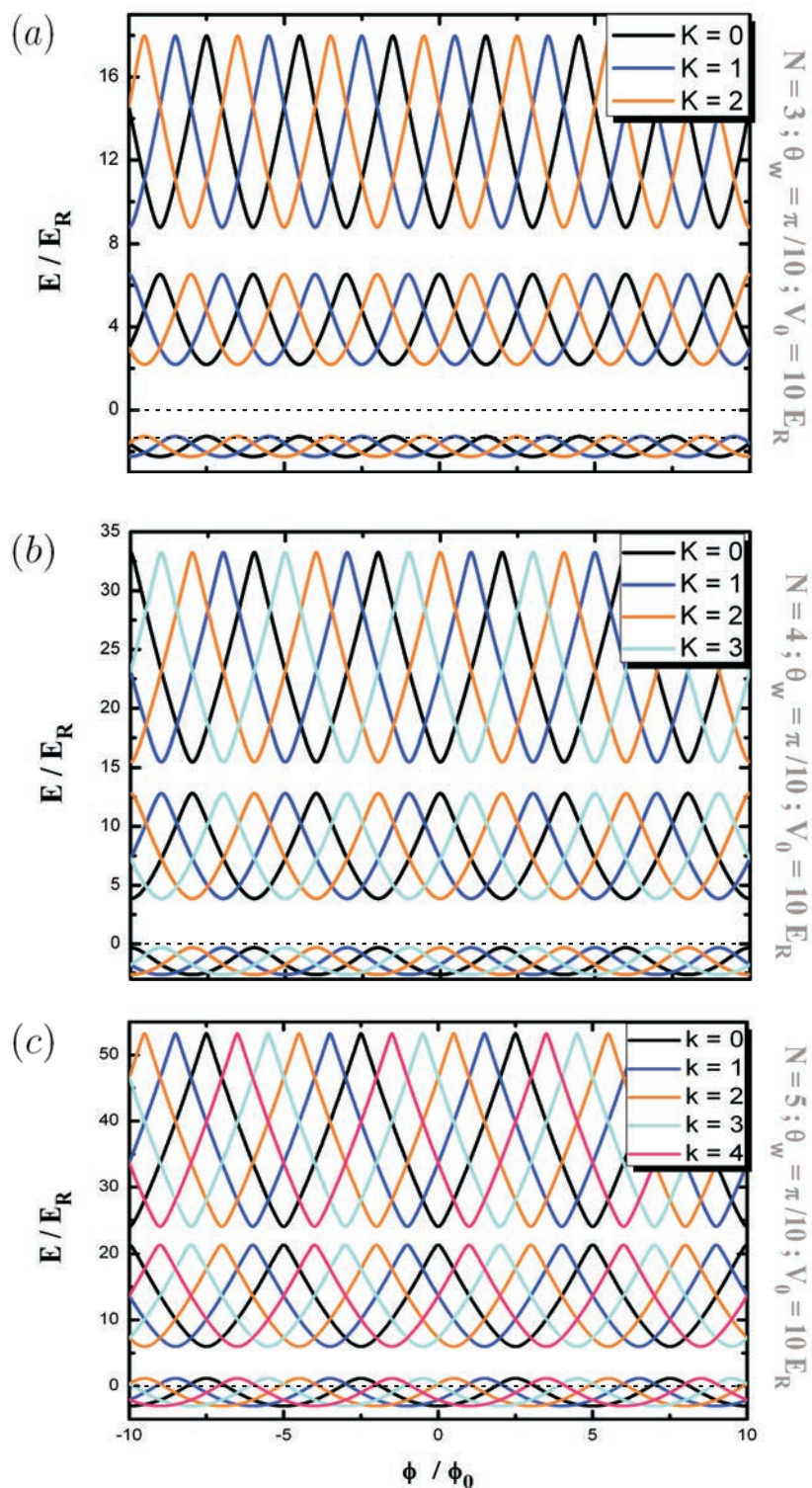


Figura 64: Influência do campo magnético sobre o espectro de energia de uma superrede formada com (a) três, (b) quatro e (c) cinco poços com $\theta_w = \pi/N$ e $V_0 = 35 E_R$.

simples, isto por causa da delocalização circunferencial dos autoestados da superrede induzida pelo acoplamento entre os poços, isto é, os estados ligados sentem a influência

do campo magnético mais significativamente no caso da presença da superrede, devido à função de onda não estar tão localizada como no caso na presença de um poço simples.

A relação geral da Eq. (4.75) para as energias da superrede na presença de campo magnético pode também ser escrita como:

$$E(k, \phi) = E\left(k + \frac{\phi}{\phi_0}\right) = E\left(-k - \frac{\phi}{\phi_0}\right) = E\left(N - k - \frac{\phi}{\phi_0}\right). \quad (4.76)$$

Como consequência da Eq. (4.76), o espectro de energia na presença de um campo magnético pode ser diretamente obtido de um campo nulo. No limite de um grande número de períodos, isto é, $1 \ll N \rightarrow \infty$, o conjunto de níveis para sequência discreta dos valores de k tende a uma dispersão quasi-contínua. Quando aumentamos N , a diferença entre dois estados de energia consecutivos ($\Delta k = \pm 1$) torna-se muito menor que a largura da minibanda.

Podemos observar também na Figura 64 que teremos sub-bandas formadas com N estados, separadas por *gaps*, sendo cada sub-banda composta pelos k 's com os valores $k = [0, N - 1]$. Tal fato é análogo ao surgimento da degenerescência pelo acoplamento devido ao tunelamento entre os poços vizinhos da superrede no modelo *tight-binding* [15], assim como aos resultados obtidos para N impurezas no capítulo anterior.

4.4.2.2 Com profundidades aleatórias

Mostramos aqui o comportamento do espectro de energia na ausência ou não de campo magnético para uma superrede formada com poços de profundidades aleatórias:

- **Na ausência de campo magnético:**

Na Figura 65 analisamos o comportamento dos estados ligados com relação ao potencial de confinamento para superredes formadas com oito, dez e dezesseis poços com (a) profundidades iguais e (b) profundidades aleatórias.

Podemos ver que a introdução da aleatoriedade no sistema quebra a simetria circular do problema, rompendo assim a degenerescência angular, uma vez que os poços que formam a superrede não estão mais igualmente espaçados, fazendo que os estados que antes estavam degenerados para $k = [\pm 1, \pm 2, \dots, \pm N - 1]$, no caso dos poços com profundidades iguais como na Figura 65(a), tornem-se não degenerados, como pode ser visto na Figura 65(b), isto é, com o aumento da profundidade para uma superrede aleatória não temos mais estados degenerados.

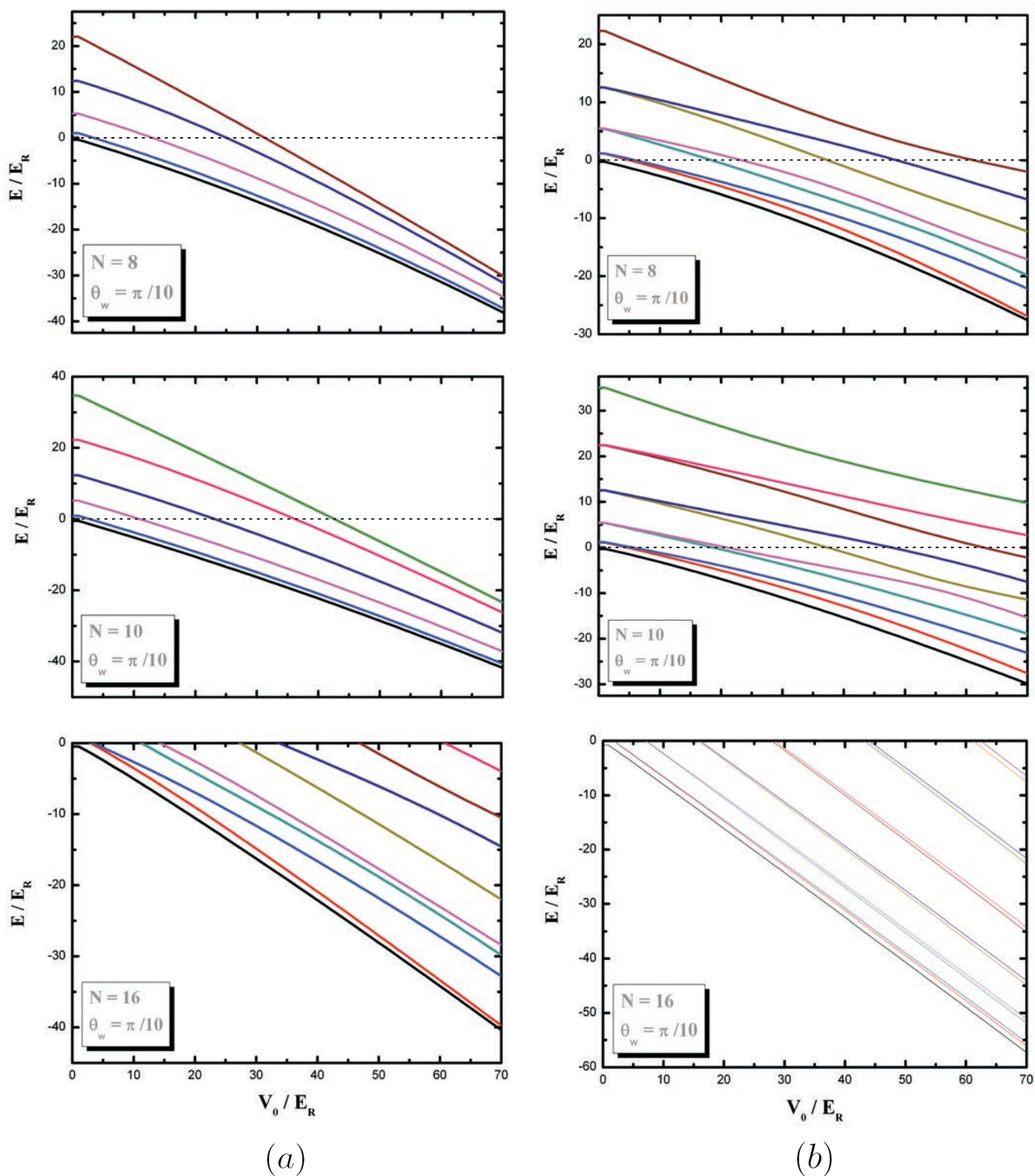


Figura 65: Variação dos estados ligados da superrede com o aumento das profundidades dos poços de potenciais para oito, dez e dezesseis poços, (a) com profundidades iguais e (b) com profundidades aleatórias, sem campo magnético com $\theta_W = \pi/10$.

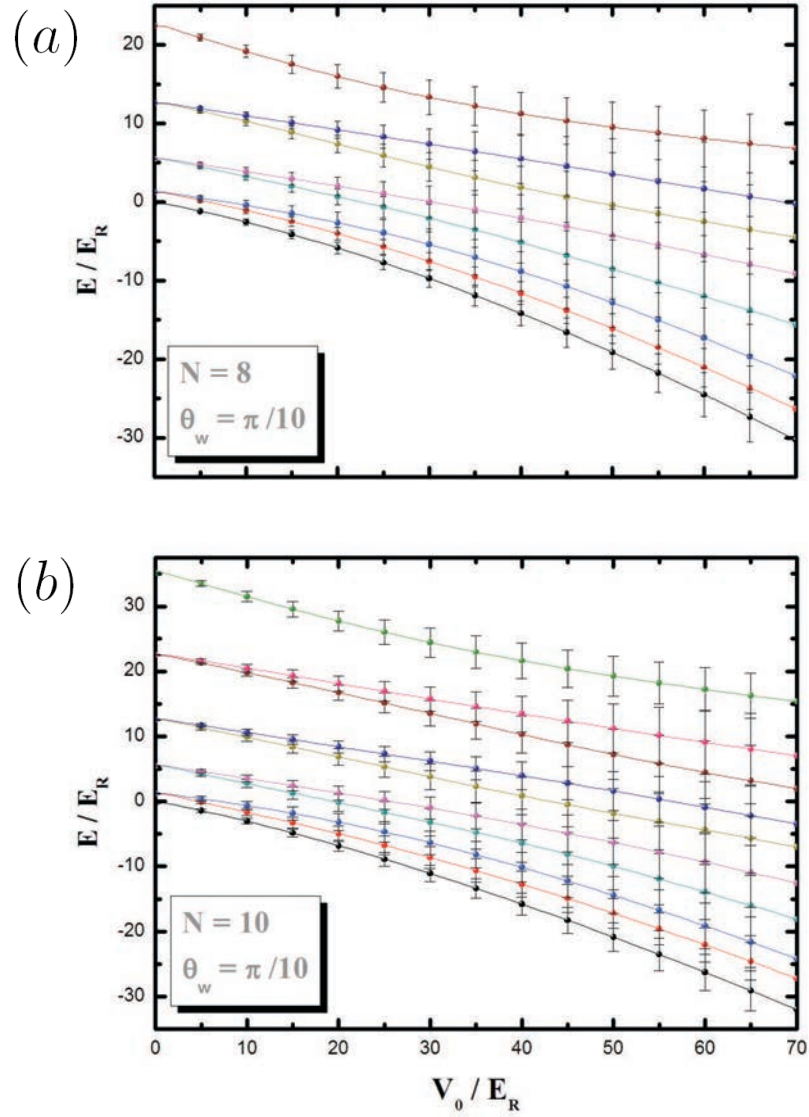


Figura 66: Comportamento da média e do desvio padrão para dez realizações feitas das variação dos níveis de energia da superrede com o aumento das profundidades dos poços de potenciais para (a) oito e (b) dez poços com profundidades aleatórias na ausência de campo magnético tomando $\theta_W = \pi/10$.

Um resultado mais coerente quando utilizamos números aleatórios é dado ao considerarmos a média de resultados obtidos ao serem analisadas várias realizações. Dessa forma, apresentamos na Figura 66 um resultado a partir da média de dez realizações, obtidas ao se introduzir dez conjuntos de três sementes na função *rand48* [70], como discutido na Seção 4.3.2.

Podemos observar da Figura 66 que o resultado médio, apresentado pelos símbolos com formato de círculos, possui o mesmo comportamento ao caso obtido devido a uma realização, Figura 65(b). Porém, ao considerarmos o desvio padrão, vemos que os estados

podem se aproximar uns dos outros, tal que o efeito da quebra de degenerescência torna-se nesse caso não muito visível, pois a margem do desvio médio é cada vez maior à medida que a profundidade do potencial aumenta.

- **Na presença de campo magnético:**

Considerando agora os efeitos do campo magnético no espectro de energia da superrede no anel quântico, ilustramos na Figura 68 tais influências nas superredes formadas com três, quatro e cinco poços com (a) profundidades iguais e (b) profundidades aleatórias, esboçadas na Figura 67.

Observamos aqui de maneira análoga ao caso de N impurezas que para N poços teremos N estados acoplados formando uma sub-banda, e que para poços de potenciais com profundidades aleatórias os *crossings* tornam-se *anti-crossings*, devido à quebra da simetria circular no anel, isto é, o anel quântico não é mais invariante rotacional com relação ao eixo z . Como já comentamos antes, teremos esses N estados juntos formando uma sub-banda devido ao tunelamento entre os estados dos poços vizinhos da superrede, sendo cada sub-banda separada por um *gap*, onde os seguintes possuem energias com valores maiores referentes aos estados subsequentes dos poços.

Na Figura 69 representamos as variações dos níveis de energia com relação ao campo magnético de uma superrede formada com poços de potencial com profundidades aleatórias para três, quatro e cinco poços. O resultado foi obtido, da mesma maneira como na Figura 66, através da compilação de dez realizações de gráficos $E \times B$ devido à introdução de dez conjuntos de números aleatórios. Vemos que o resultado médio, mostrado pelos símbolos com formato de círculos, possui as mesmas características dos resultados obtidos pela Figura 68: (i) formação das sub-bandas e (ii) a quebra da degenerescência entre os estados que formam uma sub-banda, exceto que agora o desvio padrão suprime a característica dos *anti-crossings*, apresentando um comportamento tendencioso ao caso do sistema sem aleatoriedade. Podemos também observar para os estados excitados acima da sub-banda composta pelos N primeiros estados, que esses estados de energia são resultados mais robusto, no sentido de que o desvio padrão é menor em comparação aos N primeiros estados, e que ele se torna cada vez menor à medida que o número N de poços formadores da superrede aumenta.

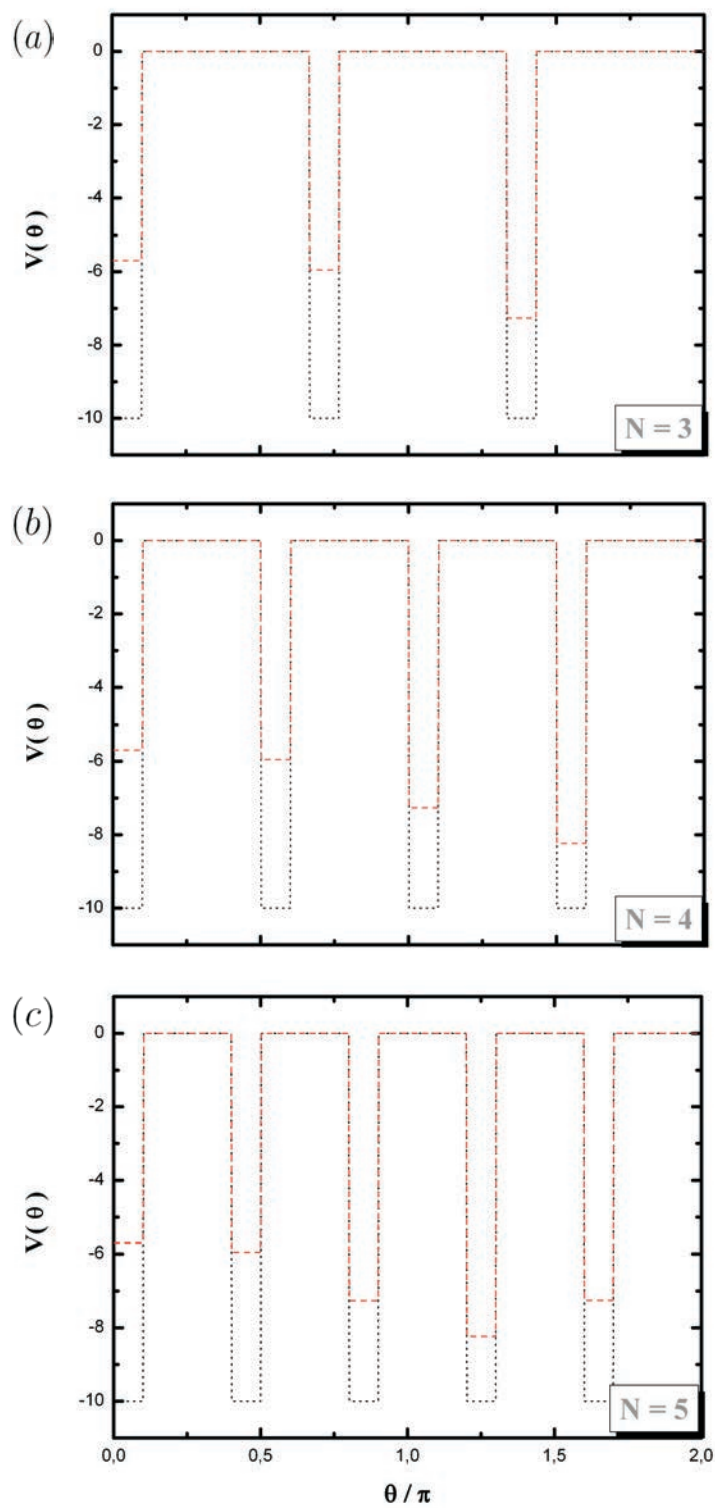


Figura 67: Esboço dos potenciais das superredes para (a) $N = 3$, (b) $N = 4$ e (c) $N = 5$ poços com profundidades iguais (pontilhado em preto) e aleatórias (pontilhado em vermelho).

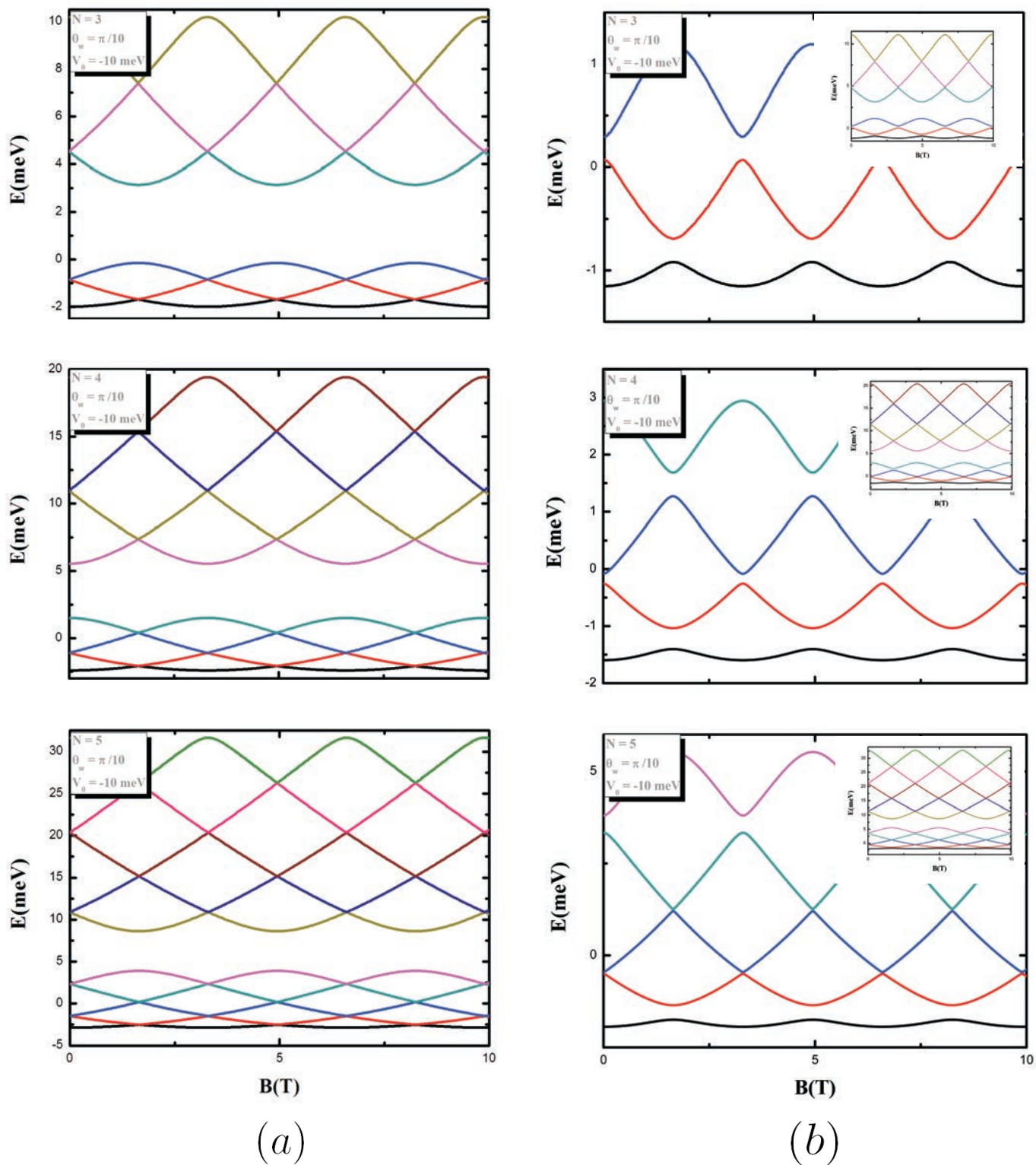


Figura 68: Influência do campo magnético sobre o espectro de energia para superredes formadas com poços de potenciais para três, quatro e cinco poços, (a) com profundidades iguais e (b) com profundidades aleatórias, com $\theta_w = \pi/10$ e $V_0 = -10$ meV.

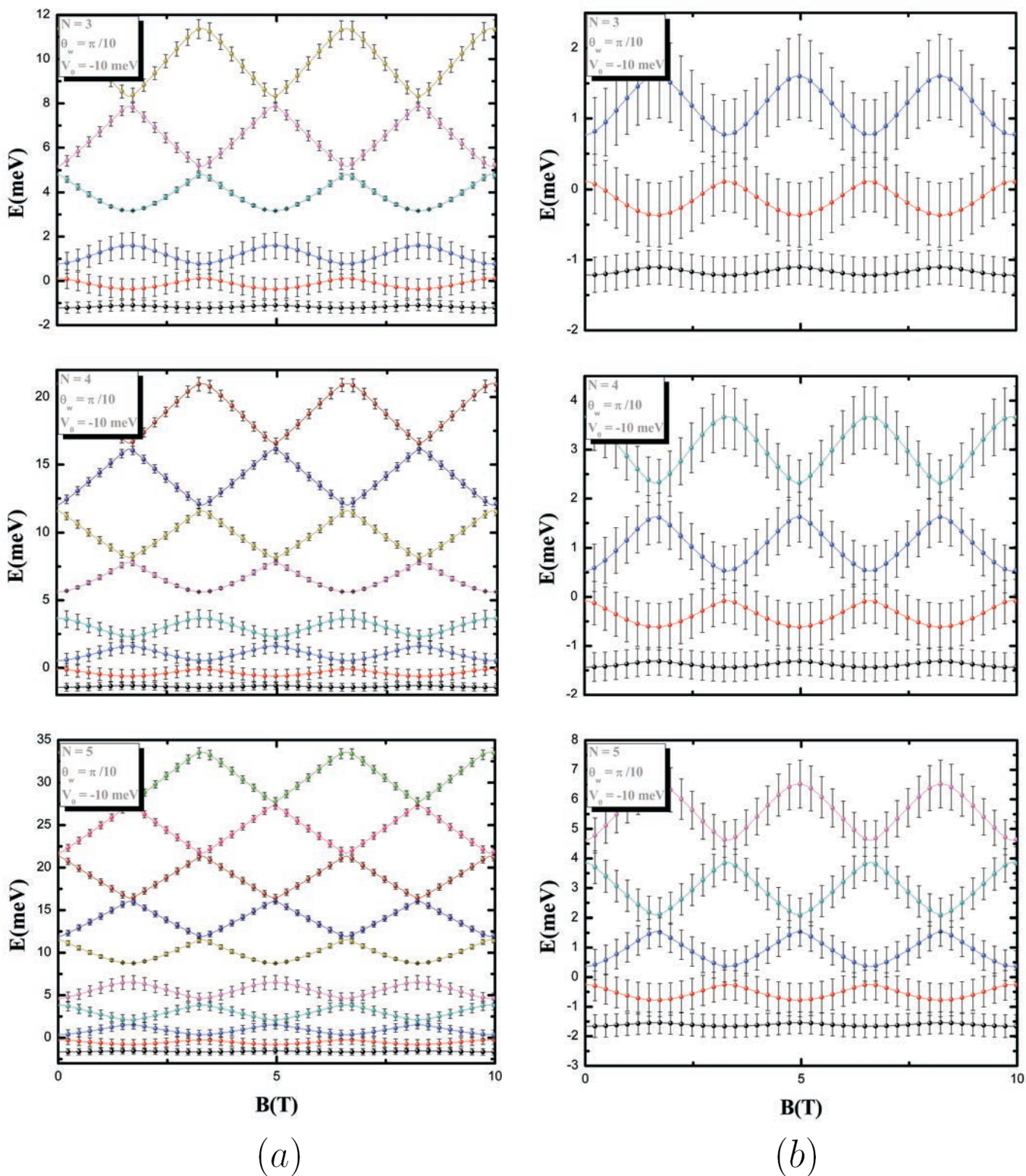


Figura 69: Comportamento médio da influência do campo magnético sobre o espectro de energia para superredes formadas com poços de potenciais para três, quatro e cinco poços com profundidades aleatórias, com $\theta_W = \pi/10$ e $V_0 = -10$ meV, obtido pela média de dez realizações distintas incluindo o desvio padrão, para (a) os $2N$ estados com as duas primeiras sub-bandas e para apenas (b) os N primeiros estados.

Capítulo 5

Excitons em anéis quânticos ideais

Neste capítulo utilizaremos o Hamiltoniano efetivo dado no final da Seção 2.1.3 e introduziremos as coordenadas relativas e do centro de massa para a solução do problema de um exciton em um anel quântico sob as aproximações já citadas. Discutiremos as condições de contorno para o problema dado por essas novas duas coordenadas. Em seguida, compararemos os espectros de energia nos dois sistemas de coordenadas, (θ_e, θ_h) e (θ, Θ) , no caso hipotético da ausência de interação Coulombiana, para encontrar as relações entre os números quânticos nos dois sistemas, já que os resultados devem ser os mesmos. Depois, obteremos numericamente os espectros de energia para um anel rugoso, simulado por um potencial de uma superrede aleatória ao longo da direção angular, e compararemos esses resultados com os autoestados do exciton em um anel ideal, bem como àqueles do problema sob a influência adicional da presença de uma impureza.

5.1 Modelo teórico

Consideremos agora o problema de um par elétron-buraco no anel quântico unidimensional, em que o potencial de interação escolhido entre o elétron e o buraco é um potencial atrativo fraco, sendo o exciton descrito na abordagem de *exciton de Wannier-Mott* [66, 67], cujas propriedades excitônicas podem ser calculadas usando a aproximação da massa efetiva. Consideramos aqui que o elétron e o buraco estão localizados no plano do anel, com o mesmo raio $R_e = R_h = R$, com coordenadas angulares θ_e e θ_h , para o elétron e buraco respectivamente, tal que $\vec{r}_e = (R, \theta_e, 0)$ e $\vec{r}_h = (R, \theta_h, 0)$ são seus vetores posição, como mostrado na Figura 70.

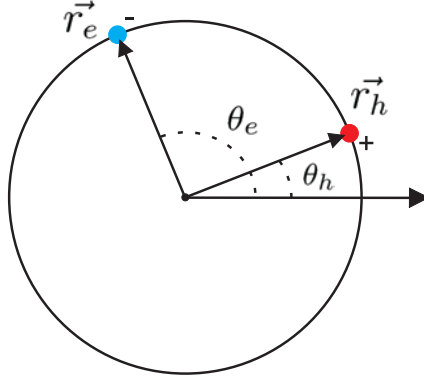


Figura 70: Representação esquemática dos vetores posição do elétron \vec{r}_e e do buraco \vec{r}_h no plano do anel.

Podemos escrever o Hamiltoniano efetivo para o exciton como

$$H_{eff(exc)} = H_{eff(e)} + H_{eff(h)} + V_C(|\theta_e - \theta_h|), \quad (5.1)$$

onde o Hamiltoniano efetivo para cada partícula, sob as aproximações citadas na Seção 2.1.1, é encontrado na Seção 2.1.3 como

$$H_{eff(j)} = -\frac{\hbar^2}{2m_j^*R^2} \frac{d^2}{d\theta_j^2} - \frac{i\hbar\omega_{c(j)}}{2} \frac{d}{d\theta_j} + \frac{m_j^*\omega_{c(j)}^2}{8} R^2, \quad (5.2)$$

com $j = e$ (elétron), h (buraco), $\omega_{c(e)} = \frac{eB}{m_e^*}$ e $\omega_{c(h)} = -\frac{eB}{m_h^*}$, uma vez que a carga elétrica do buraco é positiva e de módulo igual à carga do elétron, como comentado na Seção 1.9. Também podemos reescrever $H_{eff(j)}$ como dado pela Eq. (2.42)

$$H_{eff(j)} = \frac{\hbar^2}{2m_j^*R^2} \left\{ -i \frac{d}{d\theta_j} \pm \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2, \quad (5.3)$$

sendo o sinal do segundo termo entre chaves positivo para caso do elétron e negativo para o caso do buraco, já que as energias do elétron e buraco têm sinais opostos, e definimos, como feito nos capítulos anteriores, a razão do fluxo magnético pelo fluxo elementar como $\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{\pi R^2 B}{h/e}$. Portanto o Hamiltoniano do exciton fica reescrito como

$$H_{eff(exc)} = \frac{\hbar^2}{2m_e^*R^2} \left\{ -i \frac{d}{d\theta_e} + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h^*R^2} \left\{ -i \frac{d}{d\theta_h} - \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 + V_C(|\theta_e - \theta_h|), \quad (5.4)$$

sendo o potencial interativo V_C , um potencial Coulombiano, temos que

$$V_C = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r|\vec{r}_e - \vec{r}_h|}. \quad (5.5)$$

Faremos uso da lei dos cossenos para reescrever a Eq. (5.5) explicitamente em termos

de R , θ_e e θ_h . Assim a distância entre o elétron e o buraco é:

$$\begin{aligned}
 |\vec{r}_e - \vec{r}_h| &= \sqrt{r_e^2 + r_h^2 - 2r_e r_h \cos(\theta_e - \theta_h)} \\
 &= \sqrt{2R^2 - 2R^2 \cos(\theta_e - \theta_h)} \\
 &= \sqrt{2R^2[1 - \cos(\theta_e - \theta_h)]} \\
 &= 2R \sqrt{\frac{1 - \cos(\theta_e - \theta_h)}{2}} \\
 &= 2R \left| \sin\left(\frac{\theta_e - \theta_h}{2}\right) \right|
 \end{aligned}$$

daí,

$$V_C = \frac{-\sigma}{2R \left| \sin\left(\frac{\theta_e - \theta_h}{2}\right) \right|}, \quad (5.6)$$

onde definimos $\sigma = e^2/4\pi\epsilon_0\epsilon_r$.

Vamos introduzir as coordenadas angulares relativa e do centro de massa do exciton, respectivamente dadas por

$$\begin{cases} \theta = \theta_e - \theta_h \\ \Theta = \frac{m_e^* \theta_e + m_h^* \theta_h}{m_e^* + m_h^*} = \mu_e \theta_e + \mu_h \theta_h \end{cases}, \quad (5.7)$$

onde $\mu_e = \frac{m_h^*}{M}$, $\mu_h = \frac{m_e^*}{M}$ e $M = m_e^* + m_h^*$ é a massa efetiva total do exciton. A coordenada do centro de massa angular descreve a translação do exciton como um todo ao longo do anel, enquanto a coordenada relativa descreve a dinâmica interna do exciton. Escrevendo explicitamente as coordenadas do elétron e do buraco em termos das coordenadas relativa e do centro de massa, usando a Eq. (5.7), encontramos facilmente que

$$\begin{cases} \theta_e = \Theta + \mu_h \theta_h \\ \theta_h = \Theta - \mu_e \theta_e \end{cases}. \quad (5.8)$$

Encontraremos agora as expressões das derivadas de primeira e segunda ordem das coordenadas θ_e e θ_h , $\frac{d}{d\theta_e}$, $\frac{d}{d\theta_h}$, $\frac{d^2}{d\theta_e^2}$ e $\frac{d^2}{d\theta_h^2}$, para em seguida substituírmos no Hamiltoniano dado pela Eq. (5.4). Assim, fazendo uso das Eqs. (5.7) e (5.8) e da regra da cadeia para as derivadas temos que:

- Para θ_e :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\theta_e} &= \frac{d\theta}{d\theta_e} \frac{d}{d\theta} + \frac{d\Theta}{d\theta_e} \frac{d}{d\Theta} \\
&= \frac{d}{d\theta} + \mu_e \frac{d}{d\Theta}.
\end{aligned} \tag{5.9}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{d\theta_e^2} &= \frac{d}{d\theta_e} \left(\frac{d}{d\theta_e} \right) = \frac{d}{d\theta_e} \left(\frac{d}{d\theta} + \mu_e \frac{d}{d\Theta} \right) \\
&= \frac{d}{d\theta_e} \left(\frac{d}{d\theta} \right) + \frac{d}{d\theta_e} \left(\mu_e \frac{d}{d\Theta} \right) \\
&= \frac{d\theta}{d\theta_e} \left(\frac{d}{d\theta} \right) \frac{d}{d\theta} + \frac{d\Theta}{d\theta_e} \left(\frac{d}{d\theta} \right) \frac{d}{d\Theta} \\
&\quad + \frac{d\theta}{d\theta_e} \left(\mu_e \frac{d}{d\Theta} \right) \frac{d}{d\theta} + \frac{d\Theta}{d\theta_e} \left(\mu_e \frac{d}{d\Theta} \right) \frac{d}{d\Theta} \\
&= \frac{d^2}{d\theta^2} + 2\mu_e \frac{d^2}{d\Theta d\theta} + \mu_e^2 \frac{d^2}{d\Theta^2},
\end{aligned} \tag{5.10}$$

já que $\frac{d\theta}{d\theta_e} = 1$.

- Para θ_h :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\theta_h} &= \frac{d\theta}{d\theta_h} \frac{d}{d\theta} + \frac{d\Theta}{d\theta_h} \frac{d}{d\Theta} \\
&= -\frac{d}{d\theta} + \mu_h \frac{d}{d\Theta}.
\end{aligned} \tag{5.11}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{d\theta_h^2} &= \frac{d}{d\theta_h} \left(\frac{d}{d\theta_h} \right) = \frac{d}{d\theta_h} \left(-\frac{d}{d\theta} + \mu_h \frac{d}{d\Theta} \right) \\
&= \frac{d}{d\theta_h} \left(-\frac{d}{d\theta} \right) + \frac{d}{d\theta_h} \left(\mu_h \frac{d}{d\Theta} \right) \\
&= \frac{d\theta}{d\theta_h} \left(-\frac{d}{d\theta} \right) \frac{d}{d\theta} + \frac{d\Theta}{d\theta_h} \left(-\frac{d}{d\theta} \right) \frac{d}{d\Theta} \\
&\quad + \frac{d\theta}{d\theta_h} \left(\mu_h \frac{d}{d\Theta} \right) \frac{d}{d\theta} + \frac{d\Theta}{d\theta_h} \left(\mu_h \frac{d}{d\Theta} \right) \frac{d}{d\Theta} \\
&= \frac{d^2}{d\theta^2} - 2\mu_h \frac{d^2}{d\Theta d\theta} + \mu_h^2 \frac{d^2}{d\Theta^2},
\end{aligned} \tag{5.12}$$

já que $\frac{d\theta}{d\theta_h} = -1$.

Desmembrando a Eq. (5.4) como

$$H_{eff(exc)} = \frac{\hbar^2}{2m_e^*R^2} \left\{ -\frac{d^2}{d\theta_e^2} - 2i\frac{\phi}{\phi_0}\frac{d}{d\theta_e} + \frac{\phi^2}{\phi_0^2} \right\} + \frac{\hbar^2}{2m_h^*R^2} \left\{ -\frac{d^2}{d\theta_h^2} + 2i\frac{\phi}{\phi_0}\frac{d}{d\theta_h} + \frac{\phi^2}{\phi_0^2} \right\} + V_C(|\theta_e - \theta_h|), \quad (5.13)$$

e calculando individualmente seus termos, utilizando as Eqs. (5.9)-(5.12), temos que:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m_e^*R^2} \left(-\frac{d^2}{d\theta_e^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_h^*R^2} \left(-\frac{d^2}{d\theta_h^2} \right) &= -\frac{\hbar^2}{2m_e^*R^2} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + 2\frac{m_e^*}{M}\frac{d^2}{d\Theta d\theta} + \left(\frac{m_e^*}{M}\right)^2 \frac{d^2}{d\Theta^2} \right) \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2m_h^*R^2} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + 2\frac{m_h^*}{M}\frac{d^2}{d\Theta d\theta} + \left(\frac{m_h^*}{M}\right)^2 \frac{d^2}{d\Theta^2} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2R^2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) \frac{d^2}{d\theta^2} - \frac{\hbar^2}{2M^2R^2} (m_e^* + m_h^*) \frac{d^2}{d\Theta^2} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \frac{d^2}{d\theta^2} - \frac{\hbar^2}{2MR^2} \frac{d^2}{d\Theta^2}, \end{aligned} \quad (5.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m_e^*R^2} \left(-2i\frac{\phi}{\phi_0}\frac{d}{d\theta_e} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_h^*R^2} \left(+2i\frac{\phi}{\phi_0}\frac{d}{d\theta_h} \right) &= \frac{\hbar^2}{2m_e^*R^2} \left[-2i\frac{\phi}{\phi_0} \left(\frac{d}{d\theta} + \mu_e \frac{d}{d\Theta} \right) \right] \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{2m_h^*R^2} \left[+2i\frac{\phi}{\phi_0} \left(-\frac{d}{d\theta} + \mu_h \frac{d}{d\Theta} \right) \right] \\ &= -\frac{i\hbar^2}{m_e^*R^2} \frac{\phi}{\phi_0} \frac{d}{d\theta} - \frac{i\hbar^2}{m_h^*R^2} \frac{\phi}{\phi_0} \frac{d}{d\theta} \\ &= -\frac{i\hbar^2}{\mu R^2} \frac{\phi}{\phi_0} \frac{d}{d\theta}, \end{aligned} \quad (5.15)$$

e

$$\frac{\hbar^2}{2m_e^*R^2} \frac{\phi^2}{\phi_0^2} + \frac{\hbar^2}{2m_h^*R^2} \frac{\phi^2}{\phi_0^2} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \frac{\phi^2}{\phi_0^2}, \quad (5.16)$$

onde usamos a relação $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$ da massa reduzida do exciton. Substituindo esses resultados na Eq. (5.13), obtemos que

$$\begin{aligned} H_{eff(exc)} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \frac{d^2}{d\theta^2} - \frac{\hbar^2}{2MR^2} \frac{d^2}{d\Theta^2} - \frac{i\hbar^2}{\mu R^2} \frac{\phi}{\phi_0} \frac{d}{d\theta} + \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \frac{\phi^2}{\phi_0^2} + V_C(|\theta|) \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left\{ -\frac{d^2}{d\theta^2} - 2i\frac{\phi}{\phi_0}\frac{d}{d\theta} + \frac{\phi^2}{\phi_0^2} \right\} + V_C(|\theta|) + \frac{\hbar^2}{2MR^2} \left\{ -\frac{d^2}{d\Theta^2} \right\} \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left\{ -i\frac{d}{d\theta} + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 + V_C(|\theta|) + \frac{\hbar^2}{2MR^2} \left\{ -i\frac{d}{d\Theta} \right\}^2. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Vemos agora que reduzimos o problema do par elétron-buraco a um problema de uma

partícula com duas coordenadas. Podemos então escrever $H_{eff(exc)}$ inteiramente como

$$H_{eff(exc)} = H_{eff(rel)} + H_{eff(CM)}, \quad (5.18)$$

onde o Hamiltoniano que descreve o movimento na coordenada relativa é dado por

$$H_{eff(rel)} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left\{ -i \frac{d}{d\theta} + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 + V_C(|\theta|), \quad (5.19)$$

e o Hamiltoniano que descreve o movimento da coordenada do centro de massa,

$$H_{eff(CM)} = \frac{\hbar^2}{2MR^2} \left\{ -i \frac{d}{d\Theta} \right\}^2. \quad (5.20)$$

O propósito principal na mudança de variável acima é usar as soluções de $H_{eff(CM)}$ e $H_{eff(rel)}$ como base para resolver o Hamiltoniano efetivo total $H_{eff(exc)}$. Outra vantagem da separação das coordenadas em relativa e centro de massa é que a interação Coulombiana aparece apenas no movimento governado por $H_{eff(rel)}$. Assim, como o Hamiltoniano excitônico é a soma desses dois termos, podemos escrever a função de onda como o produto abaixo:

$$\varphi_{exc}(\Theta, \theta) = \sum_{N, N'} A_{N, N'} \varphi_{CM(N)}(\Theta) \varphi_{rel(N')}(\theta), \quad (5.21)$$

onde $N(N')$ representa o N -ésimo(N' -ésimo) autoestado do Hamiltoniano $H_{eff(CM)}(H_{eff(rel)})$.

Da mesma forma que podemos construir uma função de onda para o exciton como o produto de suas soluções, no caso do Hamiltoniano efetivo separado em termos do movimento relativo e do centro de massa, podemos também tomar a solução para o Hamiltoniano efetivo inicial dado em termos das coordenadas do elétron e do buraco, Eq. (5.4), como o produto de suas soluções, isto é,

$$\Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h) = \sum_{n_e, n_h} A'_{n_e, n_h} \Psi_{e(n_e)}(\theta_e) \Psi_{h(n_h)}(\theta_h), \quad (5.22)$$

que deve satisfazer as seguintes condições de contorno:

$$\begin{cases} \Psi_{exc}(\theta_e + 2\pi, \theta_h) = \Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h) \\ \Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h + 2\pi) = \Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h) \\ \Psi_{exc}(\theta_e + 2\pi, \theta_h + 2\pi) = \Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h) \end{cases}. \quad (5.23)$$

As funções de onda Eqs. (5.21) e (5.22) devem ser equivalentes, já que são soluções de um mesmo problema físico, implicando na igualdade

$$\Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h) = \varphi_{exc}(\Theta, \theta). \quad (5.24)$$

Partindo das Eqs. (5.7), (5.8) e (5.23), encontraremos agora as condições de contorno que devem ser satisfeitas pela função de onda Eq. (5.21):

- Pela condição $\Psi_{exc}(\theta_e + 2\pi, \theta_h) = \Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h)$:

Como

$$\begin{aligned}\Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h) &= \varphi_{exc}(\Theta, \theta) \\ &= \varphi_{exc}(\mu_e \theta_e + \mu_h \theta_h, \theta_e - \theta_h),\end{aligned}$$

usando a condição de contorno para $\theta_e \rightarrow \theta_e + 2\pi$, temos

$$\begin{aligned}\Psi_{exc}(\theta_e + 2\pi, \theta_h) &= \varphi_{exc}(\mu_e(\theta_e + 2\pi) + \mu_h \theta_h, \theta_e + 2\pi - \theta_h) \\ &= \varphi_{exc}(\mu_e \theta_e + \mu_h \theta_h + 2\pi \mu_e, \theta_e - \theta_h + 2\pi) \\ &= \varphi_{exc}(\Theta + 2\pi \mu_e, \theta + 2\pi),\end{aligned}$$

portanto

$$\varphi_{exc}(\Theta + 2\pi \mu_e, \theta + 2\pi) = \varphi_{exc}(\Theta, \theta). \quad (5.25)$$

- Pela condição $\Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h + 2\pi) = \Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h)$:

Equivalentemente

$$\begin{aligned}\Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h) &= \varphi_{exc}(\Theta, \theta) \\ &= \varphi_{exc}(\mu_e \theta_e + \mu_h \theta_h, \theta_e - \theta_h),\end{aligned}$$

e usando a condição de contorno para $\theta_h \rightarrow \theta_h + 2\pi$, temos

$$\begin{aligned}\Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h + 2\pi) &= \varphi_{exc}(\mu_e \theta_e + \mu_h(\theta_h + 2\pi), \theta_e - (\theta_h + 2\pi)) \\ &= \varphi_{exc}(\mu_e \theta_e + \mu_h \theta_h + 2\pi \mu_h, \theta_e - \theta_h - 2\pi) \\ &= \varphi_{exc}(\Theta + 2\pi \mu_h, \theta - 2\pi),\end{aligned}$$

portanto

$$\varphi_{exc}(\Theta + 2\pi \mu_h, \theta - 2\pi) = \varphi_{exc}(\Theta, \theta). \quad (5.26)$$

- Pela condição $\Psi_{exc}(\theta_e + 2\pi, \theta_h + 2\pi) = \Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h)$:

Como

$$\begin{aligned}\Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h) &= \varphi_{exc}(\Theta, \theta) \\ &= \varphi_{exc}(\mu_e \theta_e + \mu_h \theta_h, \theta_e - \theta_h),\end{aligned}$$

usando a condição de contorno para $\theta_e \rightarrow \theta_e + 2\pi$ e $\theta_h \rightarrow \theta_h + 2\pi$, temos

$$\begin{aligned}\Psi_{exc}(\theta_e + 2\pi, \theta_h + 2\pi) &= \varphi_{exc}(\mu_e(\theta_e + 2\pi) + \mu_h(\theta_h + 2\pi), (\theta_e + 2\pi) - (\theta_h + 2\pi)) \\ &= \varphi_{exc}(\mu_e \theta_e + \mu_h \theta_h + 2\pi\mu_e + 2\pi\mu_h, \theta_e - \theta_h) \\ &= \varphi_{exc}(\Theta + 2\pi(\mu_e + \mu_h), \theta) \\ &= \varphi_{exc}\left(\Theta + 2\pi\left(\frac{m_e^*}{M} + \frac{m_h^*}{M}\right), \theta\right) \\ &= \varphi_{exc}(\Theta + 2\pi, \theta),\end{aligned}$$

portanto

$$\varphi_{exc}(\Theta + 2\pi, \theta) = \varphi_{exc}(\Theta, \theta). \quad (5.27)$$

Analisando o Hamiltoniano da Eq. (5.20) vemos que o movimento do centro de massa angular é livre, mesmo na presença de campo magnético, e que suas soluções já normalizadas, encontradas de maneira análoga ao desenvolvimento realizado na Seção 2.2, mas utilizando agora a condição de contorno Eq. (5.27), são

$$\varphi_{CM}(\Theta) = \varphi_{CM(N)}(\Theta) = \frac{e^{iN\Theta}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (5.28)$$

com autoenergias dadas por

$$E_{CM(N)} = \frac{\hbar^2 N^2}{2MR^2}, \quad (5.29)$$

onde $N = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

Na ausência de interação coulombiana entre o elétron e o buraco, isto é, fazendo $V_C(|\theta|) = 0$, temos que o Hamiltoniano $H_{eff(rel)}$ fica na forma

$$H_{eff(rel)} \longrightarrow \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left\{ -i \frac{d}{d\theta} + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2, \quad (5.30)$$

que possui o mesmo formato do Hamiltoniano da Eq. (2.47) na Seção 2.2, sendo resolvido da mesma maneira, ou seja,

$$\varphi_{rel}(\theta) = \varphi_{rel(N')}(\theta) = \frac{e^{iN'\theta}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (5.31)$$

com autoenergias dadas por

$$E_{rel(N')} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left\{ N' + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2, \quad (5.32)$$

onde as restrições sobre o número quântico N' serão discutidas mais adiante.

Como a energia total é dada por

$$E_{eff(exc)} = E_{eff(rel)} + E_{eff(CM)}, \quad (5.33)$$

então, na ausência do potencial interativo, temos que a energia é

$$E_{eff(exc)}^{N,N'} = \frac{\hbar^2 N^2}{2MR^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left\{ N' + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2. \quad (5.34)$$

Devemos notar que o espectro de energia para os dois Hamiltonianos que descrevem o problema, sendo em sistemas de coordenadas diferentes, um em (Θ, θ) e o outro em (θ_e, θ_h) , deve possuir os mesmos resultados independente das coordenadas tomadas. Assim devemos ter

$$E_{eff(rel)} + E_{eff(CM)} = E_{eff(e)} + E_{eff(h)}. \quad (5.35)$$

Na ausência do potencial interativo, temos que o Hamiltoniano Eq. (5.4) na representação do elétron e do buraco torna-se

$$H_{eff(exc)} \longrightarrow \frac{\hbar^2}{2m_e^* R^2} \left\{ -i \frac{d}{d\theta_e} + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h^* R^2} \left\{ -i \frac{d}{d\theta_h} - \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2, \quad (5.36)$$

com autoenergias dadas por

$$E_{eff(exc)}^{n_e, n_h} = \frac{\hbar^2}{2m_e^* R^2} \left\{ n_e + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h^* R^2} \left\{ n_h - \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2, \quad (5.37)$$

onde n_e e n_h são números inteiros, sendo essas as mesmas soluções para cada partícula como aquelas dadas pela Eq. (2.53).

Portanto, como o espectro de energia é o mesmo em ambas as representações, utilizaremos a Eq. (5.35) para relacionar os números quânticos N e N' com os números n_e e n_h , para o caso em que $V_C(|\theta|) = 0$. Igualando as Eqs. (5.34) e (5.37), temos que:

$$\frac{\hbar^2 N^2}{2MR^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left\{ N' + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e^* R^2} \left\{ n_e + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h^* R^2} \left\{ n_h - \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2. \quad (5.38)$$

Manipulando algebricamente a Eq. (5.38) encontramos

$$\begin{cases} N = n_e + n_h \\ N' = n_e\mu_h - n_h\mu_e \end{cases}, \quad (5.39)$$

ou ainda, reescrevendo N' em termos de N , temos

$$N' = N\mu_h - n_h = n_e - N\mu_e, \quad (5.40)$$

sendo N, n_e e n_h números inteiros.

Ao reescrevermos a função de onda, solução do Hamiltoniano efetivo da coordenada relativa, Eq. (5.31), trocando o número quântico N' pelos seus valores dados pela Eq. (5.40), obtemos

$$\varphi_{rel}(\theta) = \varphi_{rel(N')}(\theta) = \frac{e^{i(N\mu_h - n_h)\theta}}{\sqrt{2\pi}} \quad \text{ou} \quad \frac{e^{i(n_e - N\mu_e)\theta}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (5.41)$$

mostrando que, embora o Hamiltoniano e a função de onda sejam desacoplados nas partes relativa e do centro de massa, o movimento relativo não é completamente independente do movimento do centro de massa, devido à simetria de translação circunferencial intrínseca do problema, pois, como já comentamos, o movimento da coordenada do centro de massa angular descreve o movimento de translação do exciton como um todo ao redor do anel, estando este ligado ao movimento relativo.

Até agora nos detivemos apenas na análise da solução para o caso em que o potencial interativo entre as partículas é desconsiderado. A dificuldade na solução desse problema surge devido à divergência do potencial para pequenos ângulos. Para contornar essa dificuldade, consideramos no presente trabalho o mesmo artifício numérico utilizado no trabalho [51]. Reescrevemos o potencial (5.6) em uma forma mais suave para remover a degenerescência angular, fazendo $V_C \rightarrow \tilde{V}_C$, com

$$\tilde{V}_C = \frac{-\sigma}{2R} \frac{1}{\sqrt{\sin^2\left(\frac{\theta_e - \theta_h}{2}\right) + a^2}}, \quad (5.42)$$

onde a é muito pequeno, de maneira ideal ($a \rightarrow 0$). Outra escolha poderia ter sido feita para suavizar a forma do potencial, como por exemplo:

$$\tilde{V}_C = \frac{-\sigma}{2R} \frac{1}{|\sin\left(\frac{\theta_e - \theta_h}{2}\right)| + a}. \quad (5.43)$$

5.2 Método numérico

Com as ferramentas desenvolvidas na Seção 2.4.1 para a solução numérica da equação de Schrödinger unidimensional utilizando a técnica de diferenças finitas torna-se possível expandir o método para o caso bidimensional. Dessa forma, mostraremos nesta seção a utilização da técnica de discretização para resolver o Hamiltoniano efetivo do exciton submetido a um potencial perturbativo dado por

$$H_{eff(exc)} = H_{eff(e)} + H_{eff(h)} + V_C(|\theta_e - \theta_h|) + V_{def(e)} + V_{def(h)}, \quad (5.44)$$

ou ainda de maneira mais explícita

$$\begin{aligned} H_{eff(exc)} = & \frac{\hbar^2}{2m_e^*R^2} \left\{ -i\frac{d}{d\theta_e} + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h^*R^2} \left\{ -i\frac{d}{d\theta_h} - \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 \\ & + V_C(|\theta_e - \theta_h|) + V_{def(e)} + V_{def(h)}. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Como vemos, o Hamiltoniano descreve um sistema bidimensional nas coordenadas (θ_e, θ_h) , tal que as soluções são funções das coordenadas do elétron e do buraco $\Psi_{exc}(\theta_e, \theta_h)$. Dessa maneira, ao aplicarmos a técnica de diferenças finitas precisamos de dois índices para descrever a função de onda em cada passo da discretização, ou seja, devemos ter $\Psi_{i,j}$, onde o índice i se refere à coordenada angular do elétron e o índice j se refere ao buraco, com $i = 1, 2, 3 \dots N_e$ e $j = 1, 2, 3 \dots N_h$. Consideramos aqui, da mesma forma como na Seção 2.4.1, que o *grid* é constante, tal que as derivadas primeira e segunda para a discretização do espaço das coordenadas do elétron e do buraco, $\Delta\theta_e$ e $\Delta\theta_h$, respectivamente, são

- Para o elétron:

$$\frac{d\Psi}{d\theta_e} = \frac{\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i-1,j}}{2\Delta\theta_e} \quad (5.46)$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\theta_e^2} = \frac{\Psi_{i+1,j} - 2\Psi_{i,j} + \Psi_{i-1,j}}{\Delta\theta_e^2} \quad (5.47)$$

- Para o buraco:

$$\frac{d\Psi}{d\theta_h} = \frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j-1}}{2\Delta\theta_h} \quad (5.48)$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\theta_h^2} = \frac{\Psi_{i,j+1} - 2\Psi_{i,j} + \Psi_{i,j-1}}{\Delta\theta_h^2} \quad (5.49)$$

Substituindo as Eqs. (5.46) - (5.49) no problema de autovalor com o Hamiltoniano

dado pela Eq. (5.45) obtemos

$$\alpha_{i+1,j}\Psi_{i+1,j} + \alpha_{i-1,j}\Psi_{i-1,j} + \alpha_{i,j}\Psi_{i,j} + \alpha_{i,j+1}\Psi_{i,j+1} + \alpha_{i,j-1}\Psi_{i,j-1} = \bar{E}\Psi_{i,j}, \quad (5.50)$$

sendo $\alpha_{i,j}$ os coeficientes das funções de onda $\Psi_{i,j}$, dados por:

$$\alpha_{i\pm 1,j} = \left[-\frac{1}{m_e^* \bar{R}^2} \frac{1}{\Delta\theta_e^2} \mp \frac{ieBr_0^2}{2m_e^* \hbar} \frac{1}{\Delta\theta_e} \right], \quad (5.51)$$

$$\alpha_{i,j} = \left[\frac{2}{m_e^* \bar{R}^2} \frac{1}{\Delta\theta_e^2} + \frac{2}{m_h^* \bar{R}^2} \frac{1}{\Delta\theta_h^2} + \frac{e^2 B^2 \bar{R}^2 r_0^4}{4\hbar^2} \frac{1}{(m_e^* + m_h^*)} + \bar{V}_{i,j} \right] \quad (5.52)$$

e

$$\alpha_{i,j\pm 1} = \left[-\frac{1}{m_h^* \bar{R}^2} \frac{1}{\Delta\theta_h^2} \pm \frac{ieBr_0^2}{2m_h^* \hbar} \frac{1}{\Delta\theta_h} \right], \quad (5.53)$$

onde $\bar{R} = R/r_0$, $\bar{V} = V/R_y$ e $\bar{E} = E/R_y$, com R_y e r_0 sendo a energia efetiva de Rydberg e o raio de Bohr respectivamente definidos pelas Eqs. (2.78) e (2.79). Todos os potenciais do problema estão incluídos no termo central $\alpha_{i,j}$, discretizados na forma $\bar{V}_{i,j}$.

Escrevendo a Eq. (5.50) na forma matricial $H_{eff(exc)}\Psi = E\Psi$ vemos que $H_{eff(exc)}$ não pode mais ser escrito como uma matriz tridiagonal, como acontece no caso unidimensional, devendo ser montada em um formato pentadiagonal em blocos, como esboçado na Figura 71. De maneira análoga ao caso discutido na Seção 2.4.1, teremos aqui termos não nulos fora das cinco diagonais devido à periodicidade da função de onda.

Como resultado da técnica de discretização aplicada ao sistema encontramos o Hamiltoniano discretizado representado por uma matriz $N_e \times N_e \times N_h \times N_h$, cujas autofunções são matrizes coluna de ordem $N_e \times N_h$, esboçadas na Figura 72.

5.3 Anel rugoso

Muitos trabalhos experimentais em anéis quânticos têm mostrado que essas estruturas apresentam defeitos geométricos [29, 78], como observado na Figura 73. Muitos foram os estudos teóricos assumindo estas irregularidades, tais como superfícies rugosas e excentricidades geométricas diferentes, ao invés de uma forma circular perfeita [31, 46, 47, 48].

Nesse sentido, consideramos nesse trabalho um modelo simples para descrever a superfície rugosa no anel quântico ideal, tratando a rugosidade como um potencial gerado por

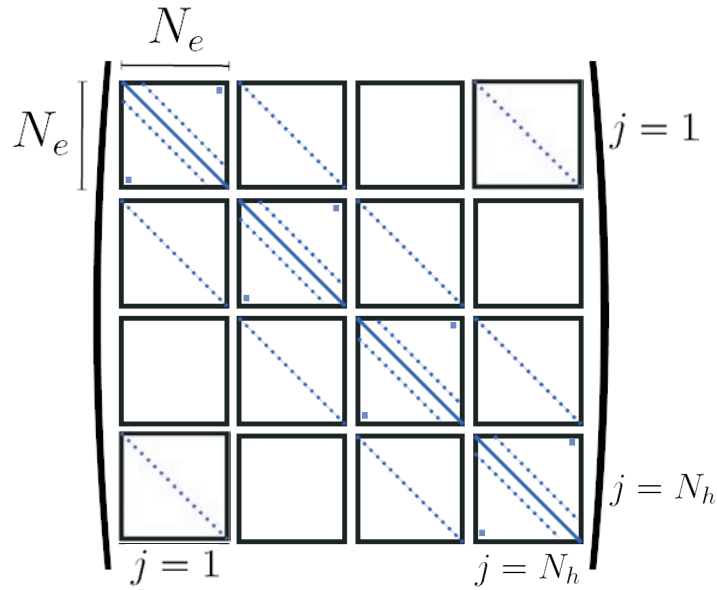


Figura 71: Esboço da matriz pentadiagonal em blocos proveniente do esquema de diferenças finitas no modelo de massa efetiva em duas dimensões. A matriz é toda nula, exceto nas diagonais representadas pelas linhas sólidas e tracejadas, isto é, para as diagonais principais e suas diagonais adjacentes dos blocos de matrizes que formam a diagonal principal da matriz total, para os elementos $((j - 1)N_e + 1, jN_e)$ e $(jN_e, (j - 1)N_e + 1)$ dos blocos da diagonal principal, para as diagonais principais dos blocos de matrizes adjacentes aos blocos de matrizes que formam a diagonal principal da matriz total e para a diagonal principal nas duas matrizes inferior esquerda e superior direita. Cada bloco consiste de uma matriz quadrada $(N_e \times N_e)$, sendo N_e o número de pontos discretizados na coordenada θ_e . Existem $(N_h \times N_h)$ blocos na matriz de $H_{eff(exc)}$, onde N_h é o número de pontos discretizados na coordenada θ_h . Dessa forma, o número total de elementos na matriz $H_{eff(exc)}$ é $N_e \times N_e \times N_h \times N_h$.

uma superrede formada por camadas com profundidades aleatórias e com larguras iguais para um número fixo de camadas. O parâmetro de rugosidade em nosso problema é o número de camadas, tal que quanto mais camadas o potencial tiver, mais rugoso é o anel. A relação entre a rugosidade e a forma do potencial aleatório é uma suposição bastante coerente, uma vez que supondo um anel com uma certa largura radial, apresentando as superfícies interna e externa rugosas, como mostrado na Figura 74, onde a largura radial é diferente ao longo da direção angular, temos que em regiões onde a largura radial é maior a função de onda tenderá a ficar mais localizada e de maneira contrária nas regiões com um afastamento menor entre as superfícies interna e externa. Assim, podemos simular essa rugosidade das superfícies do anel quântico em termos da forma do potencial, de maneira que regiões angulares com um forte confinamento possuirão um potencial com profundidade maior, isto é, quanto maior for a espessura radial, maior será a profundidade do potencial.

Os efeitos da rugosidade no problema de um só elétron são descritos pelo seguinte

$$\Psi = \begin{bmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \Psi_{i-1,j-1} \\ \Psi_{i,j-1} \\ \Psi_{i+1,j-1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \Psi_{i-1,j} \\ \Psi_{i,j} \\ \Psi_{i+1,j} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \Psi_{i-1,j+1} \\ \Psi_{i,j+1} \\ \Psi_{i+1,j+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix}_{N_e \times N_h}$$

Figura 72: Função de onda proveniente do esquema de diferenças finitas no modelo de massa efetiva em duas dimensões. Ψ é representada por uma matriz coluna composta por N_h matrizes $(1 \times N_e)$.

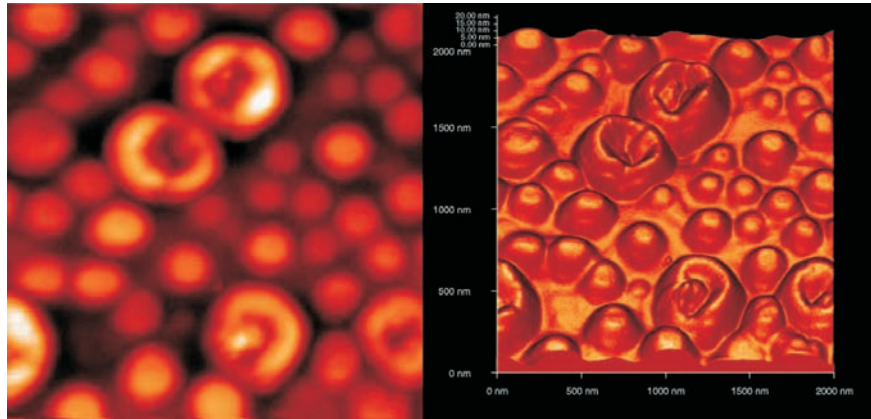


Figura 73: Imagens de AFM 2D e 3D mostrando ambos pontos e anéis quânticos. Temperatura de crescimento igual a 680°C . Os diâmetros externos dos anéis e pontos são de 550–580 e 230–340 nm com alturas 7–16 e 3–10 nm, respectivamente [78].

Hamiltoniano efetivo:

$$H_{eff} = \frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \left\{ -i \frac{d}{d\theta} + \frac{\phi}{\phi_0} \right\}^2 + V_{SL}(\theta), \quad (5.54)$$

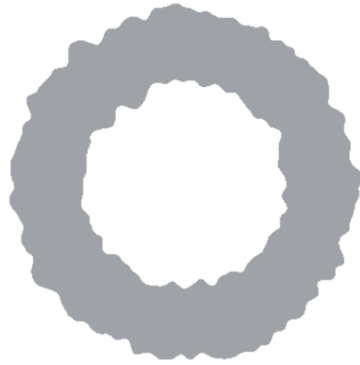


Figura 74: Perfil esquemático das superfícies interna e externa de um anel bidimensional com rugosidade [31].

da mesma maneira como consideramos no Capítulo 4, com o potencial da superrede aleatória dado por

$$V_{SL}(\theta) = -V_0 \cdot \text{nrnd}(p) \quad \text{para } p\theta_W < \theta < (p+1)\theta_W \quad (5.55)$$

sendo $p = 0, 1, 2, \dots, N_{CAM} - 1$, N_{CAM} o número de camadas, V_0 a profundidade do potencial, θ_W a largura angular das camadas e $\text{nrnd}(p)$ o p -ésimo número aleatório, gerado pela subrotina *rand48* [70], sempre com as sementes de entrada $-37, 0$ e 23 .

5.4 Resultados e discussões

Nesta seção consideramos primeiramente os efeitos da rugosidade no espectro de energia do anel para o problema de apenas um elétron. Em seguida, analisamos o espectro de energia do exciton em dois casos: considerando ou não a influência do potencial interativo elétron-buraco. Por último, introduzimos uma impureza no sistema e verificamos como ela afeta o comportamento dos primeiros níveis de energia do exciton.

- **Anel rugoso**

Mostramos na Figura 75 os efeitos do campo magnético no espectro de energia de um elétron em um anel rugoso, descrito pelo Hamiltoniano Eq. (5.54). Construímos os gráficos tomando três valores distintos para a profundidade máxima, $V_0 = -10, -20$ e -30 meV, possuindo cada gráfico resultados para três números de camadas diferentes, $N_{CAM} = 100, 200$ e 500 . Representamos na Figura 76 as três formas de potenciais rugosos utilizadas na obtenção dos espectros de energia da Figura 75, tomando as larguras angulares de cada camada como sendo constante e de valor igual à $\theta_W = 2\pi/N_{CAM}$ na Eq.(5.55).

De acordo com o Figura 75, podemos concluir que a energia do estado fundamental (preto), sofre uma translação, em geral, aumentando a energia à medida que aumentamos o parâmetro de rugosidade. Este resultado está de acordo com os já encontrados nas referências [31, 47]. Vemos também que o efeito Aharonov-Bohm torna-se mais forte à medida que aumentamos o parâmetro de rugosidade, isto é, à medida que aumentamos o número de camadas do potencial a amplitude dos *anti-crossings* entre os níveis de energia diminui. Esse resultado, que à primeira vista parece contra-intuitivo, pode ser explicado pelo seguinte fato: quando o potencial é formado por um número muito grande de camadas, possuindo a mesma largura angular, a função de onda não tenderá se confinar em nenhuma região privilegiada ao longo do anel. Podemos também observar, ao compararmos as Figuras 75 (a), (b) e (c), que para um potencial que descreve a rugosidade com poços mais profundos teremos estados de energia mais ligados, isto é, com valores mais baixos de energia. Isso já era esperado, pois acontece de maneira similar na solução de poços de potencial quadrado simples ao aumentarmos suas profundidades. Como consequência, os estados mais presos devido aos potenciais mais profundos são menos suscetíveis a campos magnéticos, o que atrapalha a observação do efeito Aharonov-Bohm. De fato, de maneira geral, temos que a presença da rugosidade, da mesma maneira como a aplicação de um campo elétrico no plano do anel, ou a presença de impurezas localizadas assimetricamente, diminui as oscilações Aharonov-Bohm, quebrando a degenerescência dos estados, isto é, tornando os *crossings* entre os estados, agora, em *anti-crossings*.

- **Exciton no anel**¹²

Como já comentamos, o potencial de interação das partículas formadoras do exciton apresenta um divergência para pequenos ângulos. Tendo em vista essa dificuldade numérica, discutimos ao longo do capítulo a solução analítica para o caso em que esse potencial é desprezado. Agora, analisaremos o espectro de energia obtido numericamente, apresentado na Figura 77, para esse caso particular e compararemos seu resultado com o obtido ao considerarmos a influência de V_C , como mostrado na Figura 78. O valor do parâmetro a do potencial V_C nos resultados que seguem é $a = 50\text{\AA}$.

Diferentemente do caso sem potencial interativo da Figura 77, em que vemos as energias do exciton variarem com o campo magnético, o resultado com a presença do potencial

¹Durante toda essa seção consideramos os seguintes valores: permissividade elétrica ($\epsilon = 12$), massa efetiva do elétron ($m_e^* = 0,07m_0$), massa efetiva do buraco ($m_h^* = 0,4m_0$), energia do *gap* do GaAs ($E_g = 1519\text{ meV}$) e raio do anel ($R = 500\text{\AA}$), encontrados na referência [51].

²Para todos os resultados obtidos nessa seção, não foi adicionada a energia do *gap* E_g à energia do sistema, uma vez que ao se considerar esse valor os resultados sofreram apenas um deslocamento no eixo da energia.

coulombiano, Figura 78, mostra que todos os estados permanecem inalterados quando variamos o campo magnético. Para as energias do exciton na ausência do potencial coulombiano temos que as parábolas dos estados de energia devem satisfazer as condições que restringem os valores dos números quânticos N e N' , dados pela Eq. (5.39), possuindo assim apenas alguns valores possíveis, sendo esse o motivo pelo qual o comportamento no espectro de energia do par é bem diferente do caso de uma só partícula.

Em contraste à crença geral de que o exciton, sendo um estado ligado de um elétron e um buraco e, assim, uma entidade neutra, não deveria ser sensível a campo magnético, alguns artigos, como por exemplo [49, 52, 79], mostram que na presença de uma interação coulombiana o efeito Aharonov-Bohm desaparece para o estado excitônico fundamental, devido o potencial possuir uma divergência intrínseca, mas que existem oscilações para as energias excitadas. Esta previsão para a energia do estado fundamental foi confirmada por experimentos de fotoluminescência em anéis [80]. Como vemos, nosso resultado concorda com os obtidos pelas referências citadas com relação ao desaparecimento do efeito Aharonov-Bohm excitônico para a energia do estado fundamental, mas entra em discrepância para os estados excitados. O motivo para a ausência de oscilação, mesmo para os níveis excitados, se deve à forma do potencial de interação, que é muito forte, confinando os estados de maneira a não enxergarem as variações no campo magnético.

No intuito de erguemos as oscilações Aharonov-Bohm introduziremos uma impureza negativa com potencial dado da mesma maneira que na Seção 3.2, Eq. (3.22), sendo agora positivo na interação impureza-elétron e negativo para a interação impureza-buraco. A Figura 79(a) mostra o perfil do potencial geral, incluindo as interações elétron-buraco, impureza-elétron e impureza-buraco, para uma impureza localizada no ângulo π .

Considerando os efeitos da impureza na energia do estado fundamental do exciton, mostramos na Figura 80 esta energia (eixo z do gráfico) como função do campo magnético e da altura da impureza. Dessa figura, vemos que para certos valores da altura da impureza z_{imp} , passamos a observar dois picos da energia, tendo um valor máximo em $z_{imp} = 45\text{\AA}$. Portanto, podemos concluir que a presença de uma impureza faz voltar a oscilação para a energia do estado fundamental do exciton, dependendo da sua localização. A priori era de se esperar que a presença de uma impureza dificultasse as oscilações na energia do exciton, pois sua presença quebra a simetria do sistema, como ocorre para o caso da presença de uma impureza no sistema de apenas um elétron no anel quântico, discutido no Capítulo 3. Por outro lado, poderia se pensar que a presença da impureza contribuiria para o surgimento das oscilações Aharonov-Bohm, pois a impureza negativa prenderia o

buraco deixando o elétron livre para oscilar. Porém, se a impureza estiver muito próxima do plano do anel, prenderá o buraco e manterá fixo o elétron em uma distância de π radianos do buraco, atrapalhando dessa vez também as oscilações do elétron. Nosso resultado apresentado na Figura 80 mostra como balancear as interações elétron-impureza e buraco-impureza para obter a maior amplitude de oscilação do exciton.

Em outra tentativa para retomar as oscilações Aharonov-Bohm no espectro de energia do exciton consideramos a influência de um campo elétrico no plano do anel na presença ou não de uma impureza negativa, como pode ser visto na Figura 81. Na ausência da impureza, vemos na parte (a) para diferentes valores da amplitude do campo elétrico, um comportamento constante para os três primeiros estados excitônicos. Já na presença de uma impureza positiva, vemos na parte (b) que para quaisquer valores do campo elétrico, exceto $F = 0$ KV/cm (linhas pretas), os estados são suprimidos anulando as oscilações Aharonov-Bohm. Esses resultados mostram a instabilidade das oscilações Aharonov-Bohm dos estados excitônicos.

Levaremos agora em conta o efeito de um potencial rugoso ($V_{rugoso}(\theta_{e(h)})$), como descrito na Seção 5.3, Eq. (5.55), tanto para o elétron como para o buraco, no espectro de energia do exciton com a presença de uma impureza negativa localizada em $\theta = \pi$ e $z_{imp} = 45\text{\AA}$. O gráfico do potencial de interação total está mostrado na Figura 79(b), onde o eixo z é o eixo do potencial em meV, $V_{int} = V_C + V_{rugoso} + V_{imp(ele-imp)} + V_{imp(h-imp)}$, dado em termos das coordenadas θ_e e θ_h . Na Figura 82 mostramos os efeitos do potencial rugoso nos três primeiros estados de energia do exciton como função do campo magnético, variando o número de camadas em (a) e aumentando a amplitude da rugosidade em (b), isto é, tomando valores das profundidades do potencial maiores.

A Figura 82 mostra, tanto na parte (a), como em (b), com os símbolos em preto, que a presença de uma impureza sob certas condições, como por exemplo, a uma certa altura, retoma as oscilações Aharonov-Bohm não apenas para a energia do estado fundamental, como já mostrado na Figura 80, mas também para as energias excitadas. Analisando o efeito da rugosidade no espectro de energia do exciton na presença da impureza vemos em (a) que ao aumentar o número de camadas que forma o potencial rugoso, tomando um valor fixo para a profundidade máxima do potencial, diminuimos a amplitude dos *anti-crossings* dos estados ao aumentarmos N_{CAM} , e em (b) temos que ao aumentar a amplitude da rugosidade os estados são transladados, de maneira que para amplitudes maiores os estados se localizaram mais a fundo do potencial, isto é, tornaram-se mais ligados. Ao compararmos esses resultados, Figura 82, com os do efeito da rugosidade

no problema de um só elétron, tratado anteriormente, vemos que são bem semelhantes, exceto pelo fato de que, no caso em questão, as oscilações são mais fracas, isto é, menos robustas.

Portanto, podemos concluir que as oscilações Aharonov-Bohm nos estados do exciton são realmente muito instáveis: mesmo quando melhoramos sua visualização na presença de uma impureza a uma certa altura, se caso incluirmos a presença de um potencial rugoso, as oscilações tornam-se mais fracas à medida que a rugosidade fica mais intensa, dificultando sua observação, ou na presença de um campo elétrico no plano do anel anula completamente as oscilações de todos os estados.

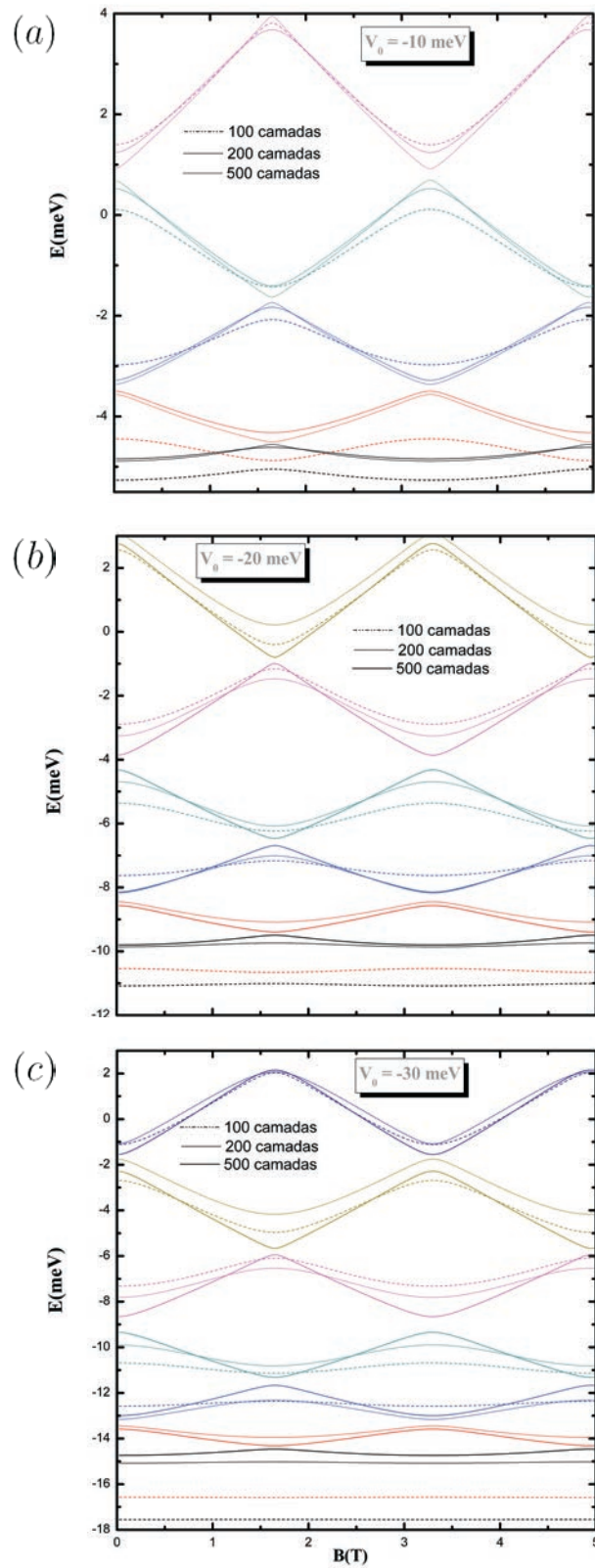


Figura 75: Espectro de energia como função do campo magnético para um elétron no anel quântico com rugosidade formada pelo potencial de superrede Eq. (5.55) com cem, duzentas e quinhentas camadas, tomando-se a largura angular constante e de valor igual à $\theta_W = 2\pi/N_{CAM}$, para as profundidades de (a) -10 meV, (b) -20 meV e (c) -30 meV.

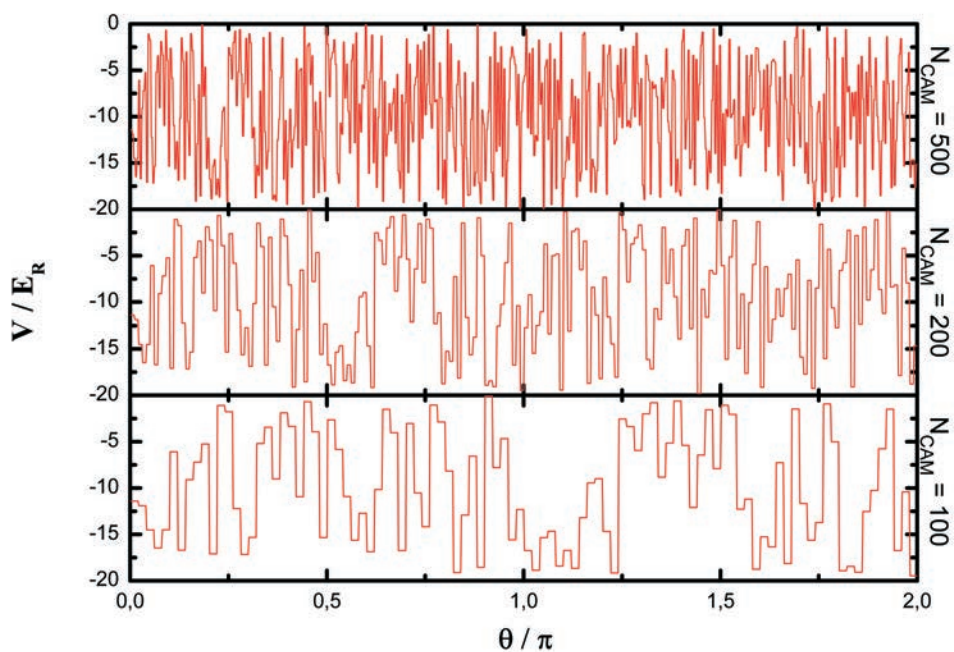


Figura 76: Perfis do potencial rugoso com cem, duzentas e quinhentas camadas, formados tomando-se as larguras angulares de cada camada como sendo constante e de valor igual à $\theta_W = 2\pi/N_{CAM}$.

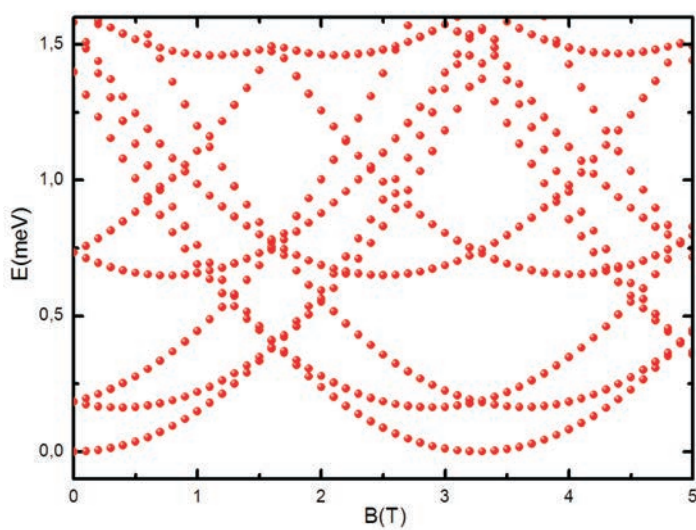


Figura 77: Espectro de energia do exciton no anel quântico na ausência de potencial coulombiano de interação elétron-buraco.

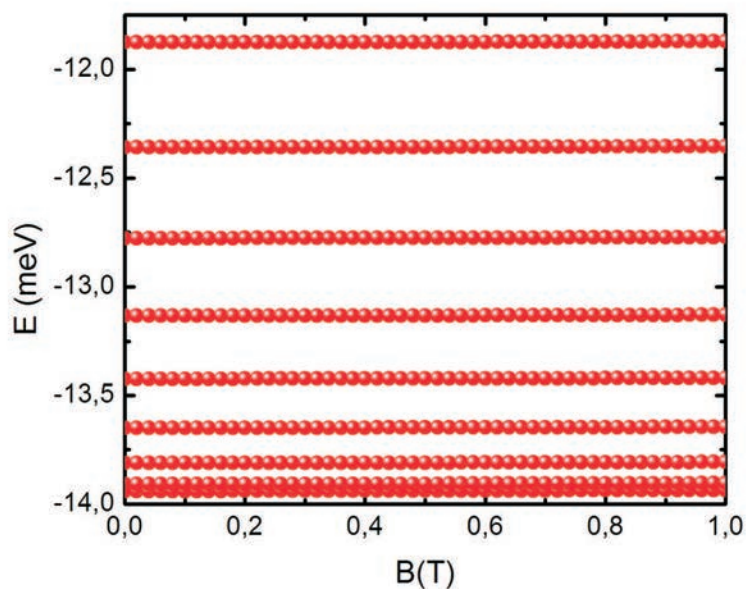


Figura 78: Espectro de energia em função do campo magnético na presença de potencial coulombiano atrativo, dado pela Eq. (5.42), tomando $a = 50\text{\AA}$ sem a presença de nenhum agente externo.

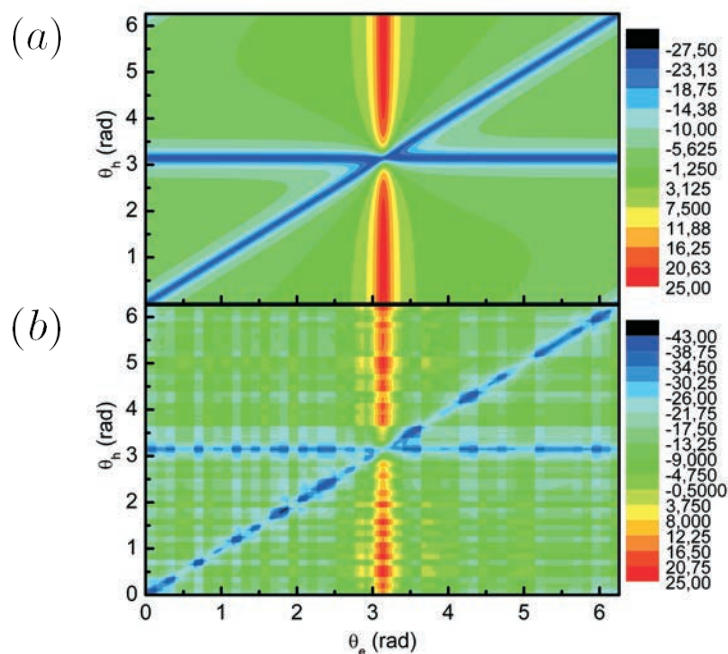


Figura 79: Potencial de interação excitônico em meV na presença de uma impureza localizada no ângulo π (a) sem e (b) com a presença de rugosidade, com potencial rugoso V_{rugoso} dado pela Eq. (5.55) para a coordenada do elétron (θ_e) e do buraco (θ_h), formado por um potencial aleatório com cento e cinquenta camadas e com valor máximo V_0 de -5 meV.

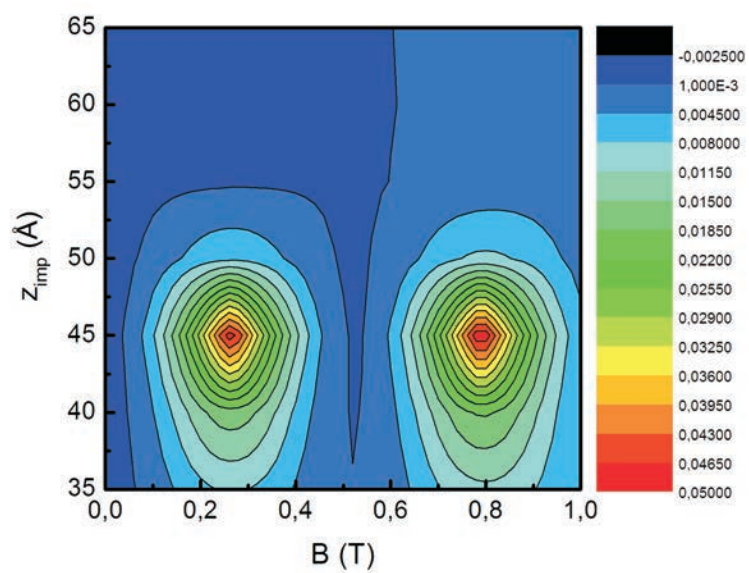


Figura 80: Energia do estado fundamental em meV, eixo z , como função do campo magnético e da altura da impureza, localizada no ângulo π .

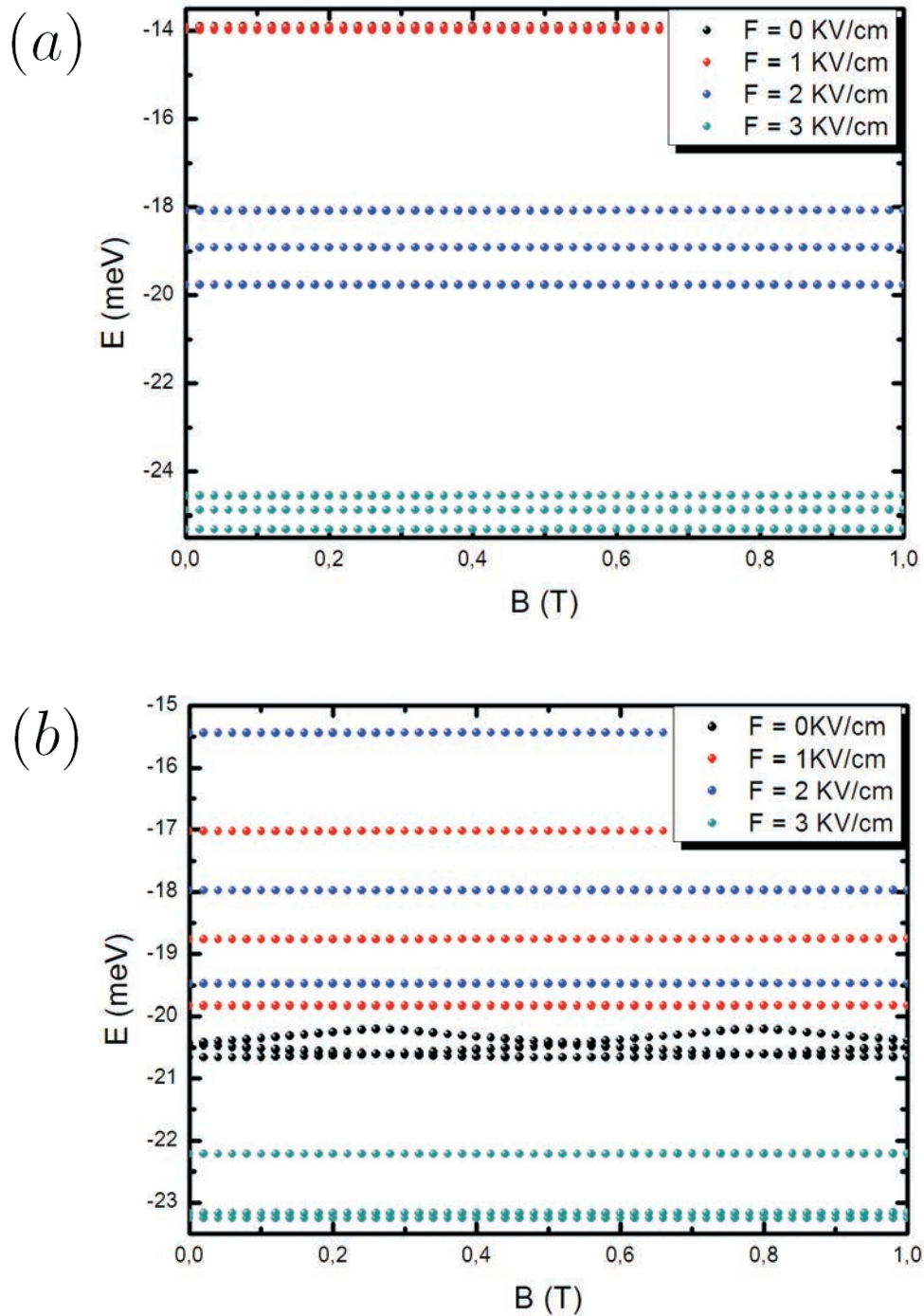


Figura 81: Comportamento dos três primeiros estados do exciton como função do campo magnético para quatro valores de campo elétrico distintos (a) na ausência e (b) na presença de uma impureza negativa localizada em $\theta = \pi$ e $z_{imp} = 45\text{\AA}$.

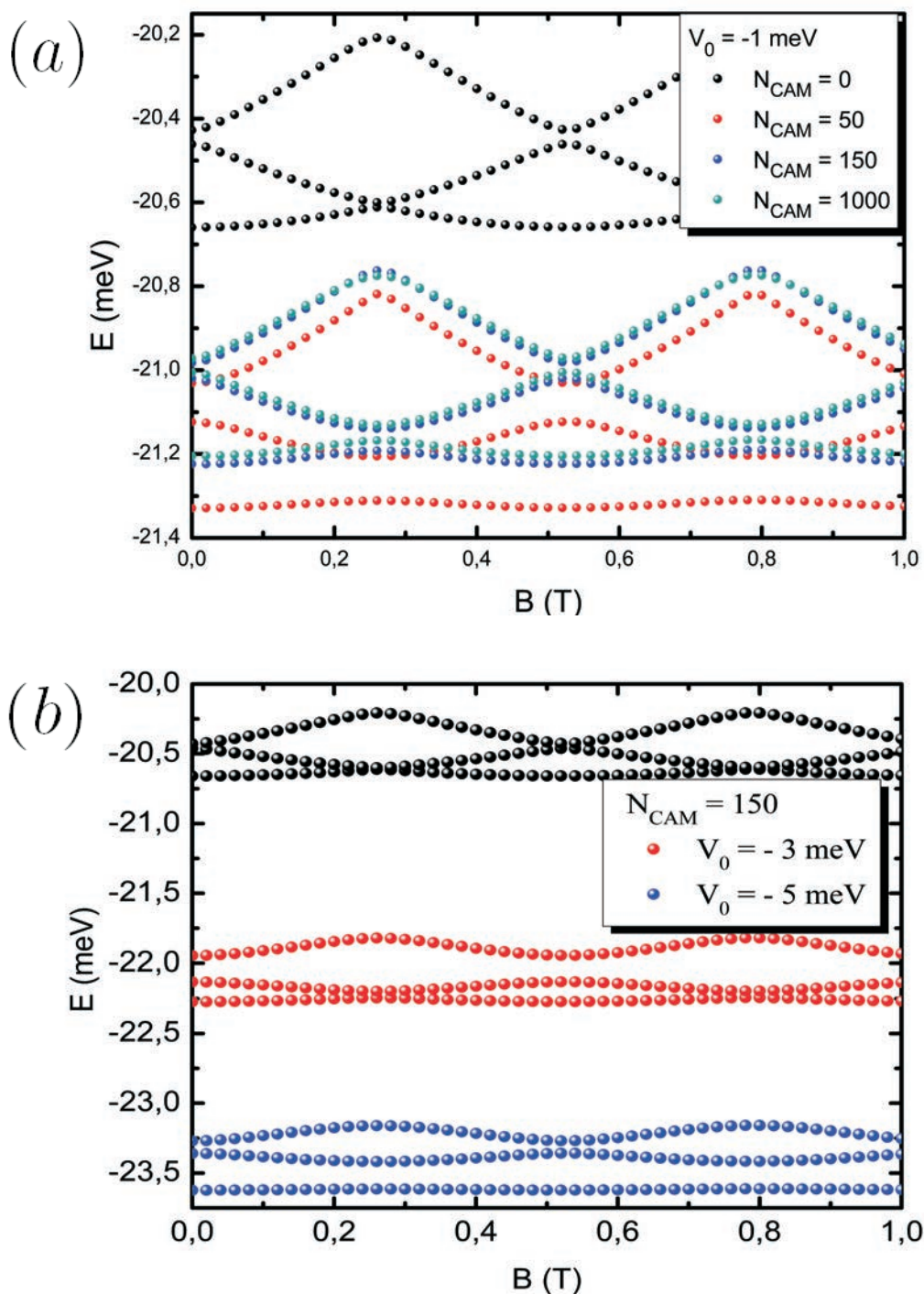


Figura 82: Espectro de energia do exciton como função do campo magnético com uma impureza localizada em $\theta = \pi$ e $z_{imp} = 45\text{\AA}$ variando (a) o número de camadas do potencial e (b) a amplitude da rugosidade, e na ausência de rugosidade, mostrado com os símbolos pretos.

Capítulo 6

Conclusões gerais e perspectivas

Neste trabalho realizamos um estudo teórico sobre um sistema heteroestruturado de baixa dimensionalidade chamado de anel quântico, dentro de algumas aproximações, tais como um intenso potencial de confinamento e raio muito maior do que a largura radial e altura do anel, tornando o problema unidimensional na coordenada angular.

No Capítulo 2, resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo para um elétron confinado em um anel quântico sob a influência de um campo magnético perpendicular ao plano do anel. Utilizando o método numérico de diferenças finitas, desenvolvemos um programa para solucionar os problemas tratados ao longo de toda dissertação. Mostramos que o mesmo está de acordo com as soluções analíticas. Investigamos tal fato comparando os resultados obtidos em ambos os métodos, numérico e analítico, para o problema do anel na ausência de qualquer influência de forças externas, obtendo o Efeito Aharonov-Bohm, onde o espectro de energia oscila periodicamente com a variação do campo magnético. Verificamos que em ambos os casos, anel ideal unidimensional com e sem influência de perturbações externas, o espectro de energia é uma função periódica do campo magnético com periodicidade dada em termos da razão do fluxo magnético que passa pelo plano do anel, pelo fluxo elementar. Na construção do Hamiltoniano efetivo assumimos o *gauge* simétrico. Porém, mostramos que qualquer outra escolha pode ser feita sem alterar as propriedades físicas do problema.

No Capítulo 3, utilizamos o Hamiltoniano efetivo desenvolvido no Capítulo 2 após uma certa transformação de *gauge*, em que já se considerou a presença de campo magnético na direção axial, para solucionar o problema submetido a uma perturbação devido à presença de campo elétrico no plano do anel. Encontramos soluções analíticas para o problema do anel com ou sem a influência do campo magnético, dadas pelas funções de Mathieu.

Analizamos numericamente em ambos os casos o espectro de energia do anel ao variarmos a intensidade do campo elétrico e do campo magnético. Mostramos que a presença de campo elétrico ergue a degenerescência angular devido à quebra da simetria rotacional do anel, já que o elétron tenderá a permanecer em uma certa região privilegiada, em torno do mínimo do potencial elétrico. Além disso, vimos que as oscilações Aharonov-Bohm são suprimidas para os níveis mais baixos de energia, o que se deve ao fato de que a quebra da degenerescência angular reflete em um aumento das amplitudes dos *anti-crossings* entre os estados, principalmente para os níveis mais baixos que estão mais localizados.

Estudamos também a influência da presença de impurezas positivas localizadas ao longo da direção angular no plano do anel. Investigamos os efeitos no espectro de energia devido ao posicionamento e o número de impurezas consideradas, localizando-as de maneira simétrica ou assimetricamente. Concluímos que quando as impurezas estão localizadas simetricamente o efeito Aharonov-Bohm é observado, enquanto para um sistema em que as impurezas não estão igualmente espaçadas o efeito não foi observado para estados de menor energia, devido à quebra de simetria circular do anel causada por estas impurezas. Ainda com relação aos estados de energia para as impurezas, foi possível concluir, com base nas figuras do Capítulo 3, que para um sistema composto por N impurezas teremos a formação de sub-bandas de energia com N estados, em que as sub-bandas são separadas por um *anti-crossing*. Vimos que os N níveis em cada sub-banda se cruzam no caso das impurezas estarem localizadas simetricamente, e apresentam *anti-crossings* com amplitudes menores do que a separação entre as sub-bandas no caso assimétrico. Na abordagem assimétrica da localização das impurezas, utilizamos também uma forma de posicionamento aleatório. Obtemos que ao aumentarmos o peso da aleatoriedade, isto é, da possibilidade da localização da impureza em uma região angular maior, aumentamos a amplitude dos espaçamentos entre os níveis de energia que formam uma sub-banda, o que nos dá uma noção sobre o quão robusto é o resultado do caso simétrico. Para os resultados obtidos pela média de dez realizações distintas, obteremos nesse caso apenas a formação de uma sub-banda composta pelos N primeiros estados mais localizados separada dos sucessivos níveis mais energéticos por um *anti-crossing* com amplitude maior do que os *anti-crossings* entre os estados da sub-banda. Já no caso do peso da aleatoriedade ser máximo, não observamos a formação de sub-bandas, vemos apenas o surgimento dos *anti-crossings* entre os estados como no caso de aleatoriedades menos intensas. Podemos concluir que o aumento do parâmetro peso da aleatoriedade remove totalmente qualquer resquício de simetria do sistema, como pode ser visto quando consideramos $w = 2\pi/N$. Já no caso $w = \pi/N$, o sistema se comporta de maneira similar ao sistema simétrico para

os níveis mais baixos, perdendo tal característica para os níveis mais energéticos.

No Capítulo 4 fizemos uso do método da matriz transferência para calcular os efeitos no espectro de energia ao introduzirmos um potencial de confinamento adicional tipo superrede formado por poços quadrados. Consideramos os casos compostos por um ou mais poços quânticos simples, com suas profundidades iguais ou aleatórias na ausência ou não de campo magnético. Para poços quânticos simples na ausência de campo magnético, vimos que ao aumentarmos a profundidade do potencial do poço aumenta-se o número de estados ligados. Já para os estados excitados temos o surgimento de degenerescências angulares. Para uma certa profundidade fixa do potencial construímos um gráfico relacionando os níveis de energia com as larguras angulares dos poços, observando novamente o levantamento das degenerescências angulares. Na presença de campo magnético, verificamos que, ao variarmos o fluxo magnético, os estados ligados permanecem praticamente constantes, e os estados excitados apresentam um comportamento parecido com as oscilações Aharonov-Bohm, exceto pelo fato dos *crossings* serem substituídos por *anti-crossings* no ponto de meio-fluxo magnético. Para superredes formadas por poços com profundidades iguais verificamos que os estados ligados formam uma “minibanda” em torno da solução para um poço quântico simples com a mesma largura angular. A largura da minibanda varia muito rapidamente com o potencial de confinamento, tornando-se mais larga quando aumentamos o número de poços com largura angular fixa. O mesmo acontece no modelo unidimensional de Kronig-Penney para uma rede cristalina formada por poços de potenciais quadrados.

Na presença de campo magnético vemos que os estados ligados são mais sensíveis às variações do fluxo magnético do que as soluções para apenas um poço quântico. Isto é devido à delocalização circunferencial dos autoestados da superrede, pois a função de onda não estará tão localizada quanto no caso de um só poço. Para o caso de superredes formadas por poços de potenciais com profundidades aleatórias, observamos os mesmos resultados em média dos obtidos com profundidades iguais, exceto pelo levantamento das degenerescências, devido à quebra da simetria angular. De maneira análoga ao que acontece para impurezas localizadas ao longo do anel, temos também para o caso de superredes formadas por poços de potenciais quadrados, que a causa do acoplamento dos N estados formando sub-bandas, sendo N o número de impurezas ou poços de potenciais, está relacionada com a simetria circular do anel, pois a presença de N entidades igualmente espaçadas levam a uma invariância rotacional no sistema caso executemos uma rotação em torno do eixo axial de $2\pi/N$. Nos casos em que os poços ou impurezas estão assimetricamente localizadas, a simetria angular não é preservada, implicando no levantamento

das degenerescências dos estados de energia de uma sub-banda, tornando as oscilações Aharonov-Bohm menos intensas.

O Capítulo 5 foi dedicado ao estudo das propriedades excitônicas no anel quântico ideal, considerando o elétron e o buraco localizados no plano do anel com o mesmo raio. Solucionamos o problema introduzindo as coordenadas relativa e do centro de massa. Considerando o caso hipotético da ausência do potencial interativo do exciton, comparamos os espectros das soluções oriundos dos dois sistemas de coordenadas, (θ_e, θ_h) e (Θ, θ) , para obtermos as relações entre seus números quânticos. Nesse caso vimos que o espectro de energia oscila como função do campo magnético. Porém, as energias do exciton na presença do potencial coulombiano permanecem inalteradas ao variarmos o campo magnético. Em contraste aos resultados encontrados na literatura [49, 52, 79], mostramos que todos os estados de mais baixa energia do exciton não oscilam quando consideramos o potencial coulombiano, não apenas para energia do estado fundamental como descrito nos artigos na literatura. O motivo da ausência de oscilação se deve ao fato de o potencial interativo ser um potencial muito forte, tornando os estados invisíveis às variações do campo magnético. Para erguer as oscilações, introduzimos uma impureza negativa localizada em $\theta_{imp} = \pi$ a uma certa altura do plano do anel. Observamos que os picos de oscilação para a energia do estado fundamental foram máximos quando $z_{imp} = 45\text{\AA}$. Na verdade, era de se esperar que a presença da impureza atrapalhasse as oscilações da energia do exciton da mesma forma como no caso do problema de um elétron. Porém, agora a presença da impureza, dependendo da sua localização, favorece as oscilações do espectro de energia. Aplicamos no Hamiltoniano excitônico um campo elétrico no plano do anel e vimos que apenas a presença do potencial elétrico não retoma as oscilações dos níveis de energia. Já na presença de uma impureza localizada em $z_{imp} = 45\text{\AA}$, vimos que a aplicação do campo elétrico anula as oscilações Aharonov-Bohm, mostrando como realmente essas oscilações da energia do exciton são instáveis.

Considerando também os efeitos de um potencial rugoso no espectro de energia do exciton na presença de uma impureza negativa localizada em $\theta_{imp} = \pi$ e $z_{imp} = 45\text{\AA}$, vimos que ao aumentarmos o número de camadas que forma o potencial rugoso diminuimos a amplitude dos *anti-crossings* entre os estados, e que ao aumentarmos a amplitude da rugosidade, dada em termos do número de camadas, os estados são transladados, tornando-se mais localizados à medida que temos potenciais mais profundos. Investigamos também os efeitos da rugosidade no espectro de energia de um elétron. Comparamos esses efeitos com os obtidos para as energias do exciton. Concluimos que eles são similares, exceto pelo fato de que, para o exciton, as oscilações são menos intensas. Por fim, chegamos a um re-

sultado conclusivo de que as oscilações Aharonov-Bohm nos estados do exciton são muito instáveis e que elas retornam na presença de uma impureza em uma certa localização.

Em trabalhos futuros daremos continuidade a esse estudo, resolvendo o problema ao implementarmos dois elétrons ao sistema do anel quântico ideal. Pretendemos ainda com relação às interações excitônicas calcular a força do oscilador, analisar com mais detalhes outras formas de potenciais de interações elétron-buraco e considerar a possibilidade do elétron e do buraco terem raios diferentes. Outra análise a ser feita é a localização de Anderson na presença de muitas impurezas localizadas aleatoriamente.

Referências

- [1] SEMICONDUTOR antes de 1900. *Tecnosapiens*. Disponível em: <<http://www.tecnosapiens.com.br/2008/09/historia-semicondutor-antes-de-1900>>. Acesso em 5 jul. 2011.
- [2] WIKIPÉDIA. *Radiofusão*. Disponível em: <<http://pt.wikipedia.org/wiki/Radiodifus%C3%A3o>>. Acesso em 6 jul. 2011.
- [3] FERREIRA, A. *História do rádio*. Disponível em: <<http://www.microfone.jor.br/historia.htm>>. Acesso em 6 jul. 2011.
- [4] MELLO, J. *A história do rádio*. Disponível em: <<http://www.bn.com.br/radios-antigos/radio.htm>>. Acesso em 6 jul. 2011.
- [5] UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO. *Laboratório de sistemas integráveis*. Disponível em: <http://www.lsi.usp.br/~chip/de_onde_vieram.html>. Acesso em 5 jul. 2011.
- [6] SILVA, T. G. *Transistor*. Disponível em: <<http://www.wix.com/tiagogarriddasilva/transistor#!historia-3>>. Acesso em 5 jul. 2011.
- [7] REZENDE, S. M.; *Materiais e dispositivos eletrônicos*. 2.ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2004.
- [8] ALFEROV, Zh. I. *The history and future of semiconductor heterostructures*. Fiz. Tekh. Poluprovodn, v. 32, p. 1-18, 1998.
- [9] EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física quântica*. Trad. Paulo Roberto da Costa Ribeiro e Enio Frota, Rio de Janeiro: Elsevier, 1979.
- [10] FETTER, A. L.; WALECKA, J. D. *Quantum theory of many-particle systems*. New York: Dover publications, 1971.
- [11] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Física do estado sólido*. Trad. Maria Lúcia Godinho de Oliveira. São Paulo: Cengage Learning, 2011.
- [12] YU, P. Y.; CARMONA, M. *Fundamentals of Semiconductors*. New York: Springer, 2005.

- [13] KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado Sólido*. Trad. Ronaldo Sérgio de Biasi. 8.ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.
- [14] LIBOFF, R. L. *Introductory Quantum Mechanics*. 4.ed. San Francisco: Addison-Wesley Publishing Company, 2003.
- [15] SAKURAI, J. J.; TUAN, S. F. *Modern Quantum Mechanics*. Boston: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [16] WENCKEBACH, W. T. *Essentials of Semiconductor Physics*. West Sussex: John Wiley and Sons, 1999.
- [17] COSTA E SILVA, J. *Confinamento Quântico em Hetero-estruturas Semicondutoras de Baixa Dimensionalidade*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2008.
- [18] SINGH, J. *Physics of semiconductors and their heterostructures*. Singapore: McGraw-Hill international editions, 1993.
- [19] HARRISON, P.; WILEY, J. *Quantum Well, Wires and Dots - Theoretical and Computational Physics*. Chichester: John Wiley & Sons, 1999.
- [20] ESAKI, L.; TSU, R. *Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors*. IBM J. Res. Dev., v. 14, p. 61-65, 1970.
- [21] ESAKI, L.; CHANG, L. L. *New transport phenomenon in a semiconductor superlattice*. Phys. Rev. Lett., v. 33, 8, 10598, 1974.
- [22] PEREIRA, T. A. S. *Confinamento Dielétrico versus Quântico em Nanoestruturas*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2006.
- [23] WANG, W. I.; STERN, F. *Valence band offset in AlAs/GaAs heterojunctions and the empirical relation for band alignment*. J. Vac. Sci. Technol. B, 3, p. 1280-1284, 1985.
- [24] YANG, L.; WATLING, J. R.; WILKINS, R. C. W.; BORIÇI, M.; BARKER, J. R.; ASENOV, A.; ROY, S. *Si/SiGe heterostructure parameters for device simulations*. Semicond. Sci. Tech., v. 19, 10, p. 1174-1182, 2004.
- [25] LI, E. H. *Material parameters of InGaAsP and InAlGaAs systems for use in quantum well structures at low and room temperatures*. Physica E, v. 5, 4, p. 215-273, 2000.
- [26] MATAGNE, P. *Quantum Modelling of Single-Electron Charging in Vertical Quantum Dots*. Tese de Doutorado, Université de Liège, Liège, 2001.
- [27] JUNIOR, F. F. MAIA; FREIRE, A. K.; FREIRE, V. N.; FARIAS, G. A.; SILVA, E. F. *Interface properties in ZnSe/ZnS based strained superlattices and quantum wells*. Appl. Surf. Sci. v. 237, p. 261-265, 2004.
- [28] BEZERRA, M. G.; FREIRE, J. A. K.; FREIRE, V. N.; FARIAS, G. A.; LIMA, F. M. S.; FONSECA, A. L. A.; NUNES, O. A. C. *Interface effects in modulation-doped GaAs/AlGaAs single quantum wells and superlattices*. Microelect. J., v. 36, p. 359-361, 2005.

- [29] KURODA, T.; MANO, T.; OCHIAI, T.; SANGUINETTI, S.; NODA, T.; KURODA, K.; SAKODA, K.; KIDO, G.; KOGUCHI, N. *Excitonic transitions in semiconductor concentric quantum double rings*. Physica E, v. 32, p. 46-48, 2006.
- [30] KURODA, T.; MANO, T.; OCHIAI, T.; SANGUINETTI, S.; SAKODA, K.; KIDO, G.; KOGUCHI, N. *Optical transitions in quantum ring complexes*. Phys. Rev. B, v. 72, 205301, 2005.
- [31] CHAVES, A.; COSTA E SILVA, J.; FREIRE, J. A. K.; FARIAS, G. A. *The role of surface roughness on the electron confinement in semiconductor quantum rings*. Microelec. J., v. 39, p. 455-458, 2008.
- [32] CHOI, H. W.; Jeon, C. W.; Liu, C.; Watson, I. M.; Dawson, M. D.; Edwards, P. R.; Martin, R. W.; Tripathy, S.; Chua, S. J. *InGaN nano-ring structures for high-efficiency light emitting diodes*. Appl. Phys. Lett., v. 86, 021101, 2005.
- [33] GRANADOS, D.; GARCIA, J. M. *In(Ga)As self-assembled quantum ring formation by molecular beam epitaxy*. Appl. Phys. Lett., v. 82, 15, p. 2401-2403, 2003.
- [34] LEVY, L. P.; DOLAN, G.; DUNSMUIR, J.; BOUCHIAT, H. *Magnetization of mesoscopic copper rings: Evidence for persistent currents*. Phys. Rev. Lett. v. 64, p. 2074-2077, 1990.
- [35] SCHULHAUSER, C.; HAFT, D.; SCHÄFLEIN, C.; KARRAI, K.; WARBURTON, R. J.; GARCIA, J. M.; SCHOENFELD, W.; PETROFF, P. M. *Giant permanent dipole moments of excitons in semiconductor nanostructures*. Physica E, v. 13, p. 161-164, 2002.
- [36] WARBURTON, R. J.; SCHULHAUSER, C.; HAFT, D.; SCHÄFLEIN, C.; KARRAI, K.; GARCIA, J. M.; SCHOENFELD, W.; PETROFF, P. M. *Giant permanent dipole moments of excitons in semiconductor nanostructures*. Phys. Rev. B, 65, 113303, 2002.
- [37] RAZ, T.; RITTER, D.; BAHIR, G. *Formation of InAs self-assembled quantum rings on InP*. Appl. Phys. Lett., v. 82, 11, p. 1706-1708, 2003.
- [38] PLANELLES, J.; CLIMENTE, J. I. *Semiconductor concentric double rings in a magnetic field*. Eur. Phys. J. B, v. 48, p. 65-70, 2005.
- [39] ROSAS, R.; RIERA, R.; MARÍN, J. L. *Electron states in a magnetic quantum ring*. J. Phys.: Condens. Matter, v. 12, p. 6851-6858, 2000.
- [40] FORMIN, V. M.; GLADILIN, V. N.; KLIMIN, S. N.; DEVREESE, J. T.; KLEEMANS, N. A. J. M.; KOENRAAD, P. M. *Theory of electron energy spectrum and Aharonov-Bohm effect in self-assembled In_xGa_{1-x}As quantum rings in GaAs*. Phys. Rev. B, v. 76, 23, 235320, 2007.
- [41] FORMIN, V. M.; GLADILIN, V. N.; DEVREESE, J. T.; KLEEMANS, N. A. J. M.; KOENRAAD, P. M. *Energy spectra and oscillatory magnetization of two-electron self-assembled In_xGa_{1-x}As quantum rings in GaAs*. Phys. Rev. B, v. 77, 205326, 2008.

- [42] PLANELLES, J.; CLIMENTE, J. I.; RAJADELL, F. *Quantum rings in tilted magnetic fields*. Physica E, v. 33, p. 370-375, 2006.
- [43] IHN, Thomas. *Semiconductor Nanostructures: Quantum States and Electronic Transport*. New York: Oxford University Press, 2010.
- [44] MONOZON, B. S.; Schmelcher P. *Impurity center in a semiconductor quantum ring in the presence of crossed magnetic and electric fields*. Phys. Rev. B, v. 67, 045203, 2003.
- [45] BRUNO-AFONSO, A.; LATGÉ, A. *Semiconductor quantum rings: Shallow-donor levels*. Phys. Rev. B, v. 61, 15887, 2000.
- [46] BRUNO-AFONSO, A.; LATGÉ, A. *Aharonov-Bohm oscillations in a quantum ring: Eccentricity and electric-field effects*. Phys. Rev. B, v. 71, 125312, 2005.
- [47] FARIAS, G. A.; DEGANI, M. H.; FREIRE, J. A. K.; SILVA, J. C.; FERREIRA, R. *Impurities and geometrical effects on the electron energy spectrum of quantum rings*. Phys. Rev. B, v. 77, 085316, 2008.
- [48] PLANELLES, J.; RAJADELL, F.; CLIMENTE, J. I. *Electron states in quantum rings with structural distortions under axial or in-plane magnetic fields*. Nanotechnology, v. 18, 375402, 2007.
- [49] RÖMER, R. A.; RAIKH, M. E. *Aharonov-Bohm effect for an exciton*. Phys. Rev. B, v. 62, p. 7045-7049, 2000.
- [50] SONG, J.; ULLOA, S. E. *Magnetic field effects on quantum ring excitons*. Phys. Rev. B, v. 63, 125302, 2001.
- [51] MASLOV, A. V.; CITRIN, D. S. *Enhancement of the Aharonov-Bohm effect of neutral excitons in semiconductor nanorings with an electric field*. Phys. Rev. B, v. 67, 121304(R), 2003.
- [52] BARKER J. A.; WARBURTON, R. J.; O'REILLY, E. P. *Electron and hole wave functions in self-assembled quantum rings*. Phys. Rev. B, v. 69, 035327, 2004.
- [53] BARTICEVIC, Z.; PACHECO, M.; SIMONIN, J.; PROETTO, C. R. *Coulomb-interaction effects on the electronic structure of radially polarized excitons in nanorings*. Phys. Rev. B, v. 73, 165311, 2006.
- [54] PETTERSSON, H.; WARBURTON, R. J.; LORKE, A.; KARRAI, K.; KOTTHAUS, J. P.; GARCIA, J. M.; PETROFF, P. M. *Excitons in self-assembled quantum ring-like structures*. Physica E, v. 6, p. 510-513, 2000.
- [55] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. 2.ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2005.
- [56] AHARONOV, Y.; BOHM, D. *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*, Phys. Rev., v. 115, p. 485-491, 1959.
- [57] CHAMBERS, R. G. *Shift of an Electron Interference Pattern by Enclosed Magnetic Flux*. Phys. Rev. Lett., v. 5, p. 3-5, 1960.

- [58] FOWLER, H. A.; MARON, L.; SIMPSON, J. A.; SUDDETH, J. A. *Electron Interferometer Studies of Iron Whiskers*. J. of App. Phys., v. 32, 1153, 1961.
- [59] REITZ, J. R.; MILFORD, F. J.; CHRISTY, R. W. *Fundamentos da teoria eletromagnética*. Trad. Renê Balduino Sander. Rio de Janeiro: Campus, 1982.
- [60] MACHADO, K. D. *Teoria do eletromagnetismo*. v. 1, 2 e 3, 2.ed. Ponta Grossa: Editora UEPG, 2005.
- [61] SZE, S. M.; NG, K. K. *Physics of Semiconductor Devices*. 3.ed. New Jersey: John Wiley and Sons, 2007.
- [62] MITIN, V. V.; KOHELAP, V. A.; STROSCIO, M. A. *Quantum Heterostructures: Microelectronics and Optoelectronics*. New York: Cambridge University Press, 1999.
- [63] CHAVES, A. *Confinamento em Fios Quânticos Semicondutores*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2007.
- [64] FRENKEL, J. *On the Transformation of Light into Heat in Solids. I*. Phys. Rev., v. 37, 1, p. 17-44, 1931.
- [65] _____. *On the Transformation of Light into Heat in Solids. II*. Phys. Rev., v. 37, 10, p. 1276-1294, 1931.
- [66] WANNIER, G. H. *The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals*. Phys. Review, v. 52, 3, p. 191-197, 1937.
- [67] MOTT, N. F. *Conduction in polar crystals. II. The conduction band and ultra-violet absorption of alkali-halide crystals*. Trans. Faraday Soc., v. 34, p. 500-506, 1938.
- [68] LEMOS, N. A. *Mecânica analítica*. 2.ed. São Paulo: Editora livraria da Física, 2007.
- [69] COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum Mechanics*, v. 1 e 2. Wiley-VHC, 1977.
- [70] PRESS, William H.; TEUKOLSKY, Saul A.; VETTERLING, William T.; FLANNERY, Brian P. *Numerical recipes in Fortran 77 : the art of scientific computing*. 2.ed. Cambridge: University Press, 1992.
- [71] MATHIEU, E. *Mémoire sur Le Mouvement Vibratoire d'une Membrane de forme Elliptique*. Journal des Mathématiques Pures et Appliquées, p. 137, 1868.
- [72] ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables*. Washington: National Bureau of Standards Applied Mathematics, 1964.
- [73] LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Quantum Mechanics*. 2.ed. Reading: Addison-Wesley Publishing Company, 1965.
- [74] HESS, K. *Advanced Theory of Semiconductor Devices*. New York: Wiley-IEEE Press, 1999.
- [75] NEAMEN, D. A. *Semiconductor Physics and Devices Basic Principles*. 3.ed. New York: McGraw-Hill, 2003.

- [76] GRUNDMANN, M. *The Physics of Semiconductors: An Introduction Including Devices and Nanophysics*. Germany: Springer, 2006.
- [77] GROSSO, G.; PARRAVICINI, G. P. *Solid State Physics*. San Diego: Academic Press, 2003.
- [78] MASHANOV, V. I.; CHENG, H. H.; CHIA, C. T.; CHANG, Y. H. *Raman study of SiGe intermixing in Ge quantum rings and dots*. Physica E, v. 28, p. 531-536, 2005.
- [79] HU, H.; ZHU, J.-L.; LI, D.-J.; XIONG, J.-J. *Aharonov-Bohm effect of excitons in nanorings*. Phys. Rev. B, v. 63, 195307, 2001.
- [80] BAYER, M.; KORKUSINSKI, M.; HAWRYLAK, P.; GUTBROD, T.; MICHEL, M.; FORCHEL, A. *Optical Detection of the Aharonov-Bohm Effect on a Charged Particle in a Nanoscale Quantum Ring*. Phys. Rev. Lett., v. 90, 186801, 2003.
- [81] CUI, Y.; WEI, Q.; PARK, H.; LIEBER, C. M. *Nanowire nanosensors for highly sensitive and selective detection of biological and chemical species*. Science, v. 293, 5533, p. 1289-1292, 2001.
- [82] BATISTA JÚNIOR, F. F. *Propriedades de Transportes em Fios e Poços Quânticos*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2009.
- [83] DE SOUZA, L. R. *Fenômenos de Transporte em Superredes de InAs/GaAs contendo Pontos Quânticos*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 2005.
- [84] CHIQUITO, A. J. *Pontos Quânticos: Átomos artificiais e transistores atômicos*. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 23, 2, p. 159-167, 2001.
- [85] GUSTAVSSON, S.; LETURCQ, R.; STUDER, M.; IHN, T.; ENSSLIN, K.; DRISCOLL, D. C.; GOSSARD, A. C. *Time-Resolved Detection of Single-Electron Interference*. Nano Lett. v. 8, 8, p. 2547-2550, 2008.
- [86] MARTINS, F.; HACKENS, B.; PALA, M. G.; OUISSE, T.; SELLIER, H.; WALLART, X.; BOLLAERT, S.; CAPPY, A.; CHEVRIER, J.; BAYOT, V.; HUANT, S. *Imaging Electron Wave Functions Inside Open Quantum Rings*. Phys. Rev. Lett. v. 99, 136807, 2007.
- [87] HACKENS, B.; MARTINS, F.; OUISSE, T.; SELLIER, H.; BOLLAERT, S.; WALLART, X.; CAPPY, A.; CHEVRIER, J.; BAYOT, V.; HUANT, S. *Imaging and controlling electron transport inside a quantum ring*. Nature Phys., v. 2, p. 826-830, 2006.
- [88] DIAS DA SILVA, L. G. G. V.; ULLOA, S. E.; GOVOROV, A. O. *Impurity effects on the Aharonov-Bohm optical signatures of neutral quantum-ring magnetoexcitons*. Phys. Rev. B, v. 70, 155318, 2004.
- [89] SZAFRAN, B.; PEETERS, F. M. *Time-dependent simulations of electron transport through a quantum ring: Effect of the Lorentz force*. Phys. Rev. B, v. 72, 165301, 2005.

- [90] LIU, J.; ZASLAVSKY, A.; FREUND, L. B. *Strain-Induced Quantum Ring Hole States in a Gated Vertical Quantum Dot*. Phys. Rev. Lett., v. 89, 096804, 2002.
- [91] LI, X. *Magnetoexciton in semiconductor concentric double rings*. Physica E, v. 41, p. 1814-1818, 2009.
- [92] MANO, T.; KURODA, T.; SANGUINETTI, S.; OCHIAI, T.; TATENO, T.; KIM, J.; NODA, T.; KAWABE, M.; SAKODA, K.; KIDO, G.; KOGUCHI, N. *Self-Assembly of Concentric Quantum Double Rings*. Nano Lett., v. 5, 3, p. 425-428, 2005.
- [93] SZAFRAN, B.; PEETERS, F. M. *Few-electron eigenstates of concentric double quantum rings*. Phys. Rev. B, v. 72, 155316, 2005.
- [94] CULCHAC, F. J.; PORRAS-MONTENEGRO, N.; LATGÉ, A. *GaAs - (Ga, Al): As double quantum rings confinement and magnetic field effects*. J. Phys. Condens. Matter, v. 20, 285215, 2008.
- [95] NOWAK, M. P.; SZAFRAN, B. *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional circular quantum rings: Elliptical deformation of confined electron density*. Phys. Rev. B, v. 80, 195319, 2009.