



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS**  
**DEPARTAMENTO DE FÍSICA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**  
**MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA**

**FRANCISCO LUCAS SANTOS OLIVEIRA**

**ESTADOS ELETRÔNICOS DE FIOS QUÂNTICOS EM BICAMADAS**  
**ROTACIONADAS DE SEMICONDUTORES ANISOTRÓPICOS BIDIMENSIONAIS**

**FORTALEZA**

**2022**

FRANCISCO LUCAS SANTOS OLIVEIRA

ESTADOS ELETRÔNICOS DE FIOS QUÂNTICOS EM BICAMADAS ROTACIONADAS  
DE SEMICONDUTORES ANISOTRÓPICOS BIDIMENSIONAIS

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.

Coorientador: Prof. Me. João Pedro Gomes do Nascimento.

FORTALEZA

2022

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Sistema de Bibliotecas  
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

- O47e      Oliveira, Francisco Lucas Santos.  
             Estados eletrônicos de fios quânticos em bicamadas rotacionadas de semicondutores anisotrópicos bidimensionais / Francisco Lucas Santos Oliveira. – 2023.  
             86 f. : il. color.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2023.  
             Orientação: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.  
             Coorientação: Prof. Dr. João Pedro Gomes do Nascimento.
1. Materiais bidimensionais. 2. Semicondutores anisotrópicos. 3. Fio quântico. 4. Propriedades eletrônicas.  
I. Título.

CDD 530

---

FRANCISCO LUCAS SANTOS OLIVEIRA

ESTADOS ELETRÔNICOS DE FIOS QUÂNTICOS EM BICAMADAS ROTACIONADAS  
DE SEMICONDUTORES ANISOTRÓPICOS BIDIMENSIONAIS

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em: 17/07/2023.

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Me. João Pedro Gomes do  
Nascimento (Coorientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. João Milton Pereira Júnior  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Vanderley Aguiar de Lima Júnior  
Universidade Estadual do Ceará (UECE)



À minha família, por sua capacidade de acreditar em mim e investir em mim. Mãe, seu cuidado e dedicação deram-me, em todos os momentos, a esperança para seguir.

## **AGRADECIMENTOS**

Quero começar esses agradecimentos dizendo o quanto sou, e serei, eternamente grato a mãezinha por tudo que ela fez, e ainda faz, por mim. Que nos meus momentos de tristeza ela me acalmava, que nos momentos que pensei em desistir ela me dava forças. Tudo que sou hoje é por causa desta mulher. Aproveito este parágrafo para agradecer ao meu irmão Davi e a minha irmã por todo o suporte emocional. Agradecer ao meu sobrinho, o bebê Samuel, que é o meu MAIOR AMOR.

Agradeço ao Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa por me aceitar como orientando, por todas os debates e pela compreensão. Agradeço a banca, Prof. Dr. Vanderley Aguiar de Lima Júnior e Prof. Dr. João Milton Pereira Júnio, pelo tempo, pelas valiosas colaborações e sugestões.

Quero agradecer aos meus amigos, Emília, Temerson, Carol, Leandro, Edine, Yago, e Michel por todo o apoio e pelos risos quando íamos almoçar ou tomar nossos cafézinhos. Quero agradecer aqui ao meu amigo e coorientador João Pedro, sem esse cara eu não estaria aqui, SÉRIO. Obrigado por tudo, meus amigos.

À Instituição Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo apoio financeiro com a manutenção da bolsa de auxílio.

“Todos somos feitos do mesmo material -  
pedaços explodidos da matéria que se formou  
no calor de estrelas.” (Blake Crouch.)

## RESUMO

Dentro da aproximação de massa efetiva, investigamos teoricamente os estados eletrônicos confinados em fios quânticos definidos eletrostaticamente em uma bicamada rotacionada polarizada e acoplada feita de semicondutores anisotrópicos bidimensionais (2D), isto é, com diferentes massas efetivas ao longo das direções  $x$  e  $y$  e com as duas camadas sendo rotacionadas uma em relação à outra. De início estudamos o comportamento das bandas de energia do sistema de bicamada infinita ao variar-se: (i) o ângulo de rotação do sistema de bicamada 2D, (ii) a orientação do campo magnético aplicado no plano em relação as direções cristalográficas, (iii) o termo de acoplamento entre as camadas, e (iv) as aplicações dos campos elétrico e magnético perpendiculares ao sistema. Em seguida, estudamos o comportamento de um fio quântico definido eletrostaticamente em uma monocamada de semicondutor anisotrópico com orientações arbitrárias em relação aos eixos cristalográficos. Resultados para os estados eletrônicos (energia e funções de onda) na presença e ausência de campo magnético perpendicular ao plano foram discutidos e comparados com trabalho recente reportado na literatura. Estendemos tal análise para a situação de campo magnético no plano, visando discussão para o caso da bicamada. Por fim, analogamente ao caso anterior em monocamada, investigamos um sistema de fios quânticos definidos em bicamada rotacionada de semicondutores anisotrópicos na presença de campos externos. Mostramos que o ângulo de orientação do campo magnético no plano atua como um parâmetro de controle funcionando como um modulador de anisotropia no sistema, levando em algumas situações aos mesmos resultados energéticos do caso isotrópico. Além disso, verificamos que os níveis de energia confinados do fio quântico e, conseqüentemente, o espaçamento dos níveis, são altamente sintonizáveis em relação ao ângulo de rotação e à orientação de alinhamento do fio quântico.

**Palavras-chave:** materiais bidimensionais; semicondutores anisotrópicos; fio quântico; propriedades eletrônicas.

## ABSTRACT

Within the effective mass approximation, we theoretically investigate the confined electronic states in electrostatically defined quantum wires in a polarized and coupled rotated bilayer made of two-dimensional (2D) anisotropic semiconductor materials, i.e., materials with different effective masses along the  $x$  and  $y$  directions, and with the two layers being rotated relative to each other. Initially, we study the behavior of the energy bands of the infinite bilayer system as the following parameters are varied: (i) the rotation angle of the 2D bilayer system, (ii) the orientation of the applied magnetic field in the plane with respect to the crystallographic directions, (iii) the coupling term between the layers, and (iv) the application of electric and magnetic fields perpendicular to the system. Then, we investigate the behavior of an electrostatically defined quantum wire in a monolayer of anisotropic semiconductor material with arbitrary orientations relative to the crystallographic axes. Results for the electronic states (energy and wave functions) in the presence and absence of a magnetic field perpendicular to the plane are discussed and compared with recent work reported in the literature. We extend this analysis to the case of a magnetic field in the plane, aiming to discuss the bilayer case. Finally, analogous to the previous monolayer case, we investigate a system of quantum wires defined in a rotated bilayer of anisotropic semiconductors in the presence of external fields. We show that the orientation angle of the in-plane magnetic field acts as a control parameter, functioning as a modulator of anisotropy in the system, leading in some situations to the same energy results as the isotropic case. Furthermore, we find that the confined energy levels of the quantum wire and, consequently, the level spacing, are highly tunable with respect to the rotation angle and alignment orientation of the quantum wire.

**Keywords:** two-dimensional materials; anisotropic semiconductors; quantum wire; electronic properties.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1	– Representação esquemática apresentando alguns constituintes da grande família formada por materiais 2D, como por exemplo: grafeno, dicalcogenetos de metais de transição, nitreto de boro hexagonal, fósforo negro, entre outros.	18
Figura 2	– Níveis de energia em heterojunções. (a) Representação de dois semicondutores um dopado tipo- $n$ e outro não. Em (b) temos dois semicondutores separados formando uma heteroestrutura. BC e BV representação respectivamente as bandas de condução e a banda de valência, e EF o nível de Fermi. (c) Alinhamento das bandas de energia dos dois semicondutores em equilíbrio numa heterojunção. (d) Representação 3D do esquema do item (c).	19
Figura 3	– Diagramas de bandas típicos para (a) metais, (b) semicondutores, e (c) isolantes a 0 K. . . . .	21
Figura 4	– Representação de uma heterojunção entre dois semicondutores intrinsecamente distintos com $gaps$ $E_{gap}^B$ e $E_{gap}^W$ diferentes, sendo $V_e$ e $V_h$ as alturas dos degraus de potencial da banda de condução e valência, respectivamente. . .	22
Figura 5	– Representação esquemática do compartimento das bandas de condução e de valência gerado por uma heteroestrutura do (a) tipo-I e do (b) tipo-II. . . .	23
Figura 6	– Representação esquemática (em cima) e densidade de estados (em baixo) para portadores com diferentes dimensionalidades: (a) <i>bulk</i> , (b) poço quântico, (c) fio quântico, e (d) ponto quântico. . . . .	25
Figura 7	– Representações de estilos de fios quânticos. (a) Fios quânticos construídos através de fotolitografia holográfica de aproximadamente 300-400 Å de largura a partir de um único poço quântico de 100 Å de InGaAs. (b) Fios quânticos com sulcos em formato de V visto através da HAADF-STEM. (c) Representação de fios quânticos heteroestruturados do tipo <i>core-shell</i> e <i>core-multishell</i> . (d) Representação de fios quânticos heteroestruturados longitudinais. . . . .	27

- Figura 8 – Representações de estilos de fios quânticos definidos eletrostaticamente. (a) Fios quânticos construídos utilizando pontas metálicas separadas por uma distância  $d$  para aprisionar o sistema, que até então é 2D, em mais uma dimensão, formando assim o fio quântico. Em (b) temos outro experimento desse sistema e que podemos ver o fio quântico na ordem de escala de 200 nm visto através SEM. . . . . 28
- Figura 9 – (a) Estrutura de bandas de um semiconductor qualquer, destacando as bandas de condução (azul) e valência (lilás). O fundo da banda de condução e o topo da banda de valência são aproximados por relações de dispersões parabólicas. (b) Ilustração de estruturas de bandas de um semiconductor anisotrópico, sendo aproximado via método da massa efetiva por parábolas com diferentes concavidades ao longo das diferentes direções: uma para a direção  $x$  ( $\Gamma - X$ , pontilhado preto) e uma para a direção  $y$  ( $\Gamma - Y$ , pontilhado vermelho). . . . 30
- Figura 10 – Exemplos de materiais 2D anisotrópicos, ilustrando suas classificações, estruturas cristalinas e aplicações práticas para diferentes dispositivos . . . . . 30
- Figura 11 – Bicamada 2DEG submetida a um campo elétrico perpendicular. Em (a), tem-se a ilustração da formação da bicamada 2DEG através da heterojunção de dois materiais distintos. Em (b), apresenta-se a ilustração esquemática da estrutura de bicamada da forma como iremos dispor durante toda esta dissertação. . . . . 36
- Figura 12 – (a) Espectro de energia para uma bicamada 2DEG desacoplada,  $\Delta = 0$ . Observe que temos bandas de energia degeneradas. (b) Note que ao considerar o fator de acoplamento,  $\Delta \neq 0$ , o sistema quebra a degenerescência. O *gap* de energia entre as bandas é de  $2\Delta$ . Os símbolos  $R_y$  e  $a_0$  representam a energia de Rydberg e o raio de Bohr, respectivamente. Temos a representação das bandas de energia tanto em 3D (à esquerda) como em 2D (à direita). A curva preta representa a isoenergia do sistema. Consideramos uma bicamada 2DEG isotrópica com a massa  $m/m_0 = 1.01$ . . . . . 38
- Figura 13 – Espectro de energia para uma bicamada 2DEG acoplada na presença de um campo elétrico perpendicular aos planos das camadas. O sistema não tem degenerescência e o *gap* de energia entre as bandas agora é de  $2\sqrt{(\delta U)^2 + \Delta^2}$ . 39

Figura 14 – Representação da bicamada de gás de elétrons bidimensionais na presença de um campo magnético com orientação arbitrária no plano $xy$ . . . . .	40
Figura 15 – Espectro de energia para uma bicamada 2DEG desacoplada na presença de um campo elétrico perpendicular aos planos e a um campo magnético no plano $xy$ . . . . .	42
Figura 16 – Espectro de energia para uma bicamada 2DEG desacoplada na presença do campo magnético. Em (a) fixamos o campo magnético na direção $\hat{x}$ , $\alpha_B = 0$ . Em (b) o campo magnético $\vec{E}$ na direção $\hat{y}$ , $\alpha_B = \pi/2$ . Consideramos $U_1 = U_2 = 0$ e $\Delta = 0$ . . . . .	43
Figura 17 – Mesmas condições da Fig. 16, porém considerando $\delta U \neq 0$ . . . . .	44
Figura 18 – Bicamada 2DEG anisotrópicos. (a) Bandas de energia para a bicamada de 2DEG tomando $\Delta = 0$ . as bandas são degeneradas. (b) As bandas de energia apresentam uma quebra da degenerescência quando consideramos $\Delta \neq 0$ . Os símbolos $R_y$ e $a_0$ representam a energia de Rydberg e o raio de Bohr, respectivamente. Temos a representação das bandas de energia tanto em 3D como em 2D. A curva preta representa a isoenergia do sistema. Consideramos uma bicamada anisotrópica de fosforeno com as massas $m_x/m_0 = 1.01$ e $m_y/m_0 = 0.19$ . . . . .	46
Figura 19 – Bicamada de gás de elétrons bidimensionais anisotrópicos na presença do campo elétrico. Em (a) temos a quebra da degenerescência das bandas por causa do campo elétrico $\delta U \neq 0$ aplicado, mesmo considerando $\Delta = 0$ . Em (b) vemos que quando consideramos $\Delta \neq 0$ e $\delta U \neq 0$ a quebra da degenerescência foi mais acentuada. . . . .	47
Figura 20 – Bicamada 2DEG anisotrópica desacoplada na presença do campo magnético no plano. Consideramos $\Delta = 0$ e $U_{1,2} = 0$ e tomamos a direção do campo magnético tal que (a) $\alpha_B = 0$ e (b) $\alpha_B = \pi/2$ . . . . .	49
Figura 21 – Mesmas condições da Fig. 20, porém considerando agora $\delta U \neq 0$ . . . . .	50
Figura 22 – Bicamada 2DEG anisotrópica acoplada na presença de campo magnético no plano. Em (a) e (b), consideramos $\delta U = U_0 = 0$ , enquanto que em (c) e (d) fixamos $U_0 = 0$ e $\delta U \neq 0$ . O campo magnético em (a) e (c) está na direção $\hat{x}$ , isto é, com $\alpha_B = 0$ . Já em (b) e (d), o campo magnético está na direção $\hat{y}$ , isto é, com $\alpha_B = \pi/2$ . . . . .	51



Figura 23 – Bicamada 2DEG anisotrópica acoplada rotacionada com um ângulo $\theta$ em relação aos eixos cristalográficos. . . . .	51
Figura 24 – Bicamada 2DEG isotrópica e anisotrópica rotacionada na presença de um campo elétrico perpendicular e a um campo magnético no plano. O ângulo $\alpha_B$ representa a rotação do campo magnético no plano e o ângulo $\theta$ representa a rotação das camadas em relação aos eixos cristalográficos. Consideramos aqui que as bicamadas estão desacopladas, isto é, $\Delta = 0$ . Os símbolos $R_y$ e $a_0$ representam a energia de Rydberg e o raio de Bohr, respectivamente. A curva preta representa a isoenergia do sistema. Nos casos isotrópicos (anisotrópicos), tomamos as massas efetivas $m_x/m_0 = m_y/m_0 = m/m_0 = 1.01$ ( $m_x/m_0 = 1.01$ e $m_y/m_0 = 0.19$ . . . . .	54
Figura 25 – Mesmas condições da Fig. 24, mas considerando agora o sistema acoplado, isto é, tomando $\Delta \neq 0$ . . . . .	55
Figura 26 – Representação esquemática do fio quântico rotacionado definido eletrostaticamente por um potencial de poço quadrado infinito 1D da seguinte forma $V(y') = V_0[(-y') + (y' - W)]$ com largura $W$ e com $V_0 > 0$ . A rotação do fio em relação aos eixos cristalográficos $x$ e $y$ é dada pela variação de $\alpha$ que defini as novas coordenadas $x'$ e $y'$ . . . . .	57
Figura 27 – Três primeiros níveis de energia para o fio quântico de fosforeno em função da sua espessura para diferentes ângulos $\alpha_W$ de alinhamento com os eixos de anisotropia. Foi considerado $k'_x = 0$ . . . . .	60
Figura 28 – Relação de dispersão de um fio quântico de fosforeno, considerando $W = 1$ nm e diferentes ângulos $\alpha_W$ de rotação. . . . .	60
Figura 29 – Níveis de energia de um fio quântico de fosforeno com $W = 1$ nm e $k'_y = 0$ em função do ângulo de rotação $\alpha_W$ . . . . .	61
Figura 30 – Módulo ao quadrado da função de onda para fios quânticos rotacionados anisotrópicos na presença de um campo magnético externo perpendicular, $B = 5$ T, com uma largura do fio fixa $L = 100$ nm e vetor de onda $k_x = 0$ . As curvas com ponto preto tracejado, vermelho tracejado e azul pontilhado correspondem ao caso dos ângulos de rotação $\alpha_W = 0$ , $\alpha_W = \pi/4$ e $\alpha_W = \pi/2$ , respectivamente. Para comparação, $ \Psi ^2$ para $B = 0$ é mostrado pela curva sólida verde. . . . .	64

Figura 31 – Relação de dispersão de fosforeno QW para diferentes ângulos de alinhamento $\alpha$ em relação aos eixos de anisotropia e largura QW fixa $W = 100$ nm e amplitude do campo magnético $B = 5$ T. Curvas sólidas pretas, tracejadas vermelhas e tracejadas azuis curtas correspondem às espectro para ângulos de rotação $\alpha_W = 0$ , $\alpha_W = \pi/4$ e $\alpha_W = \pi/2$ , respectivamente. . . . .	65
Figura 32 – Níveis de energia de um fio quântico de fosforeno com largura $L = 100$ nm em função do campo magnético para valores de vetor de onda (a) $k_x = 0$ e (b) $k_x = 0,2 \text{ nm}^{-1}$ para diferentes ângulos de rotação $\alpha$ em relação ao eixos de anisotropia. . . . .	66
Figura 33 – Relação de dispersão para um fio quântico com largura de $L = 100$ nm tomando diferentes ângulos de rotação para o fio quântico ( $\alpha_W$ ) enquanto fixamos o ângulo do campo magnético ( $\alpha_B$ ) em algumas direções em relação aos eixos de anisotropia do fosforeno. Observe que ao alinharmos o fio quântico com o campo magnético, a relação de dispersão tende ao caso $B_0 = 0T$ . . . . .	69
Figura 34 – Níveis de energia em função da largura de fio quântico com $k_x = 0$ para diferentes ângulos de rotação $\alpha_W$ e fixando a rotação do campo magnético em relação aos eixos de anisotropia e tomando as massas efetivas da monocamada fosforeno. Observe que ao alinharmos o fio quântico com o campo magnético o sistema tende a se comportar de forma análoga ao caso $B_0 = 0 \text{ T}$ . . . . .	70
Figura 35 – Níveis de energia considerando $n = 1$ (linhas sólidas) e $n = 10$ (linhas pontilhadas) em função do ângulo de rotação $\alpha_W$ fixando o campo magnético em direções específicas em relação aos eixos de anisotropia para fosforeno. Foi considerado $L = 100$ nm e $k_x = 0$ . Observe que ao alinharmos o fio quântico com o campo magnético o sistema tende a se comportar de forma análoga ao caso $B_0 = 0 \text{ T}$ . . . . .	71
Figura 36 – Representação do fio quântico em uma bicamada anisotrópica rotacionada na presença de um campo magnético no plano. . . . .	72

- Figura 37 – Níveis de energia mais baixos para as sub-bandas inferiores ( $E_{n=1}^-$  - curvas pontilhadas) e superiores ( $E_{n=1}^+$  - curvas tracejadas) na ausência de campos magnéticos externos (Eq. (4.28) com  $B_0 = 0$ ), tomando (a)  $\Delta = 0$  (bicamada desacoplada 2DEGs) e (b)  $\Delta = 0.5$  meV (bicamada acoplada 2DEGs). As curvas preta, vermelha e azul correspondem ao alinhamento do fio quântico  $\alpha_W = 0$ ,  $\alpha_W = \pi/4$  e  $\alpha_W = \pi/2$ , respectivamente. Aqui, foram considerados  $d = 10$  nm,  $W = 100$  nm e  $\theta = 0$  para a distância entre as camadas, a largura do fio e o ângulo de torção entre as camadas, respectivamente. No painel (a)  $E_{n=1}^+(\Delta = 0) = E_{n=1}^-(\Delta = 0)$ . . . . . 77
- Figura 38 – Gráficos de  $E_n(k_x)$  para vários valores de  $B_0$  e  $\alpha_B$ , e  $\theta = \alpha_W = 0$  fixos. Nesta figura consideramos  $d = 10$  nm,  $W = 100$  nm e  $\Delta = 0,5$  meV. As massas efetivas consideradas são as de um sistema isotrópico:  $m_x = m_y = m_e$ , onde  $m_e$  é a massa do elétron livre. . . . . 80

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Sistemas de dimensionalidade reduzida e seus respectivos números de graus de liberdade $D_l$ e de confinamento $D_c$ . . . . .	24
Tabela 2 – Massas efetivas dos elétrons em alguns semicondutores . . . . .	29
Tabela 3 – Exemplos de materiais semicondutores anisotrópicos e seus valores de massas efetivas para o elétron ao longo das diferentes direções cristalográficas. . . .	31

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>	<b>17</b>
<b>1.1</b>	<b>Dos 2DEG's aos materiais 2D . . . . .</b>	<b>17</b>
<b>1.2</b>	<b>Gás de elétrons 2D . . . . .</b>	<b>18</b>
<b>1.3</b>	<b>Semicondutores, metais e isolantes . . . . .</b>	<b>20</b>
<b>1.4</b>	<b>Heteroestruturas semicondutoras . . . . .</b>	<b>21</b>
<b>1.5</b>	<b>Confinamento Quântico . . . . .</b>	<b>24</b>
<b>1.6</b>	<b>Fio quântico . . . . .</b>	<b>25</b>
<b>1.7</b>	<b>Aproximação da massa efetiva . . . . .</b>	<b>27</b>
<b>1.8</b>	<b>Níveis de Landau . . . . .</b>	<b>31</b>
<b>1.9</b>	<b>Escopo do trabalho . . . . .</b>	<b>33</b>
<b>2</b>	<b>BICAMADA DE GÁS DE ELÉTRONS BIDIMENSIONAL ROTACIONADA SOB EFEITOS DE CAMPOS EXTERNOS . . . . .</b>	<b>35</b>
<b>2.1</b>	<b>Bicamada de gás de elétrons bidimensionais isotrópicos . . . . .</b>	<b>35</b>
<b>2.1.1</b>	<i>Na ausência de campos externos . . . . .</i>	<i>37</i>
<b>2.1.2</b>	<i>Na presença de campo elétrico perpendicular . . . . .</i>	<i>39</i>
<b>2.1.3</b>	<i>Na presença de um campo magnético no plano . . . . .</i>	<i>40</i>
<b>2.2</b>	<b>Bicamada de gás de elétrons bidimensionais anisotrópicos . . . . .</b>	<b>44</b>
<b>2.2.1</b>	<i>Na ausência de campos externos . . . . .</i>	<i>45</i>
<b>2.2.2</b>	<i>Na presença de campo elétrico perpendicular . . . . .</i>	<i>45</i>
<b>2.2.3</b>	<i>Na presença de um campo magnético no plano . . . . .</i>	<i>47</i>
<b>2.3</b>	<b>Bicamada de gás de elétrons bidimensionais anisotrópica rotacionada na presença de um campo elétrico perpendicular e um campo magnético no plano . . . . .</b>	<b>49</b>
<b>3</b>	<b>PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE FIOS QUÂNTICOS SEMICON- DUTORES ANISOTRÓPICOS . . . . .</b>	<b>57</b>
<b>3.1</b>	<b>Fios quânticos anisotrópicos . . . . .</b>	<b>57</b>
<b>3.1.1</b>	<i>Na ausência de campos magnéticos . . . . .</i>	<i>58</i>
<b>3.1.2</b>	<i>Na presença de um campo magnético perpendicular . . . . .</i>	<i>61</i>
<b>3.1.3</b>	<i>Na presença de campo magnético no plano . . . . .</i>	<i>65</i>

<b>4</b>	<b>PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE FIOS QUÂNTICOS SEMICON-</b>	
	<b>DUTORES ANISOTRÓPICOS DEFINIDOS EM BICAMADAS ROTA-</b>	
	<b>CIONADAS . . . . .</b>	<b>72</b>
<b>4.1</b>	<b>Bicamada rotacionada . . . . .</b>	<b>72</b>
<b>4.1.1</b>	<b><i>Bicamada na ausência de rotação e do campo magnético . . . . .</i></b>	<b>75</b>
<b>4.1.2</b>	<b><i>Bicamada acoplada com campo magnético . . . . .</i></b>	<b>78</b>
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS . . . . .</b>	<b>81</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>83</b>

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 Dos 2DEG's aos materiais 2D

O mundo científico experimentou uma grande evolução no século XX devido ao desenvolvimento da mecânica quântica. Os investimentos em pesquisa básica e aplicada ajudaram nesse desenvolvimento ocasionando assim o surgimento do ramo da eletrônica que marcou o século XX. Desde então, a presença crescente dos dispositivos da indústria eletrônica na vida em sociedade tem gerado uma grande necessidade e expectativa por equipamentos mais avançados e sofisticados. No entanto, acredita-se que a indústria atual de semicondutores esteja alcançando o limite das melhorias de desempenho em suas tecnologias no que se diz respeito ao domínio do uso do silício. Como resultado, há uma busca por novos materiais com propriedades e vantagens únicas em relação ao silício e que possam ser controladas por campos externos. Esse cenário tem impulsionado pesquisas na área de Física da Matéria Condensada, que tem se mostrado ser fundamental para o avanço da eletrônica moderna (SIMON, 2013).

Uma das grandes recentes descobertas nesta direção foi a obtenção experimental dos materiais bidimensionais (2D). Estes são exemplos de materiais de baixa dimensionalidade, onde as cargas possuem mobilidade eletrônica em duas direções e é confinada na terceira. A primeira síntese experimental de materiais com essa característica ocorreu em 2004 pelo grupo de pesquisa liderado por Andre Geim e Konstantin Novoselov (NOVOSELOV; AL., 2004). Eles, através do método de esfoliação mecânica, isolaram o grafeno, uma estrutura do tipo de favo de mel composta por átomos de carbono. Esse material apresenta propriedades únicas, tais como: uma alta mobilidade eletrônica, uma alta resistência mecânica à tensões, e quanto à absorção de luz ele é capaz de absorver cerca de 2,3% da luz incidente (NETO; AL., 2009). Este marco foi importante não só apenas no aspecto tecnológico pelas várias possibilidades de aplicações, como também pelo fato do grafeno ser um *playground* para observações de fenômenos descritos pelas teorias quânticas de campo, e mais ainda, por ter impulsionado a pesquisa buscando vários outros novos materiais 2D, como ilustra a Fig. 1 apresentando diversas famílias de materiais lamelares. Grande parte dessas propriedades exóticas surgem devido a natureza eletrônica do grafeno por apresentar bandas de energia cônicas, caracterizado-o como um semicondutor de *gap* nulo (KATSNELSON, 2007).

Com a descoberta experimental do grafeno, a comunidade científica buscou encontrar outros materiais lamelares que compartilhassem das mesmas vantagens do grafeno, como alta

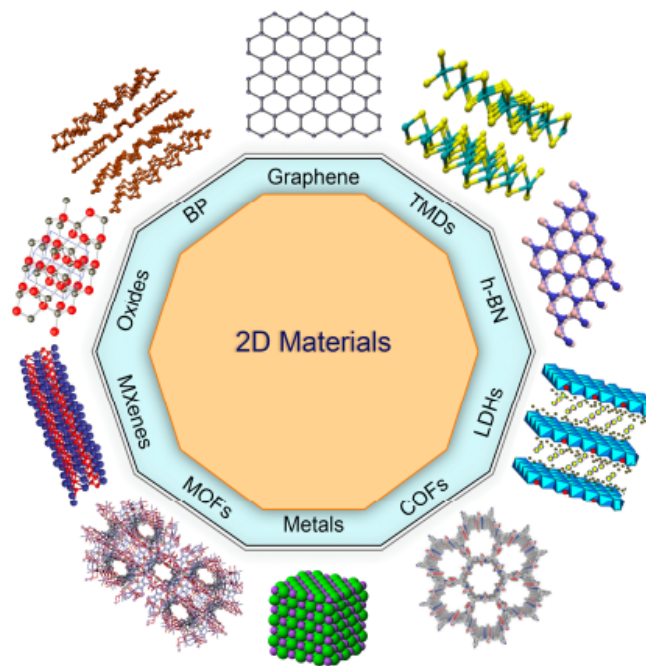


Figura 1 – Representação esquemática apresentando alguns constituintes da grande família formada por materiais 2D, como por exemplo: grafeno, dicalcogenetos de metais de transição, nitreto de boro hexagonal, fósforo negro, entre outros. Figura adaptada da Ref. (KALANTARI; ZHANG, 2022).

mobilidade eletrônica, mas que não exibissem um *gap* nulo (NETO; AL., 2009; KATSNELSON, 2007). Materiais 2D obtidos após o grafeno puderam ser produzidos/sintetizados através do mesmo processo de esfoliação do grafeno, em virtude das fracas ligações de van der Waals entre as camadas, permitindo a obtenção de amostras com poucas ou únicas camadas (NOVOSELOV; AL., 2004). Isso levou à descoberta de um zoológico de materiais de camada única, tais como o silicene e o germaneno, formados por camadas únicas de silício (PADOVA; AL., 2014) e germânio (DÁVILA; AL., 2014), respectivamente, assim como toda a classe conhecida como dicalcogenetos de metais de transição (RADISAVLJEVIC; AL., 2011) (ver Fig. 1).

## 1.2 Gás de elétrons 2D

Para ilustrar o conceito de gás de elétrons 2D, vamos apresentar o sistema, como no caso de uma junção de dois semicondutores com diferentes dopagens, como mostrado na Fig. 2(a). Para ilustrar o alinhamento das bandas da junção desses semicondutores, apresenta-se na Fig. 2(b) os níveis de energia de um semicondutor A dopado com átomos doadores, que introduzem elétrons livres no material, e que tem uma maior largura de banda proibida dessa junção, e um semicondutor B que será um semicondutor sem dopagem, tal que o semicondutor



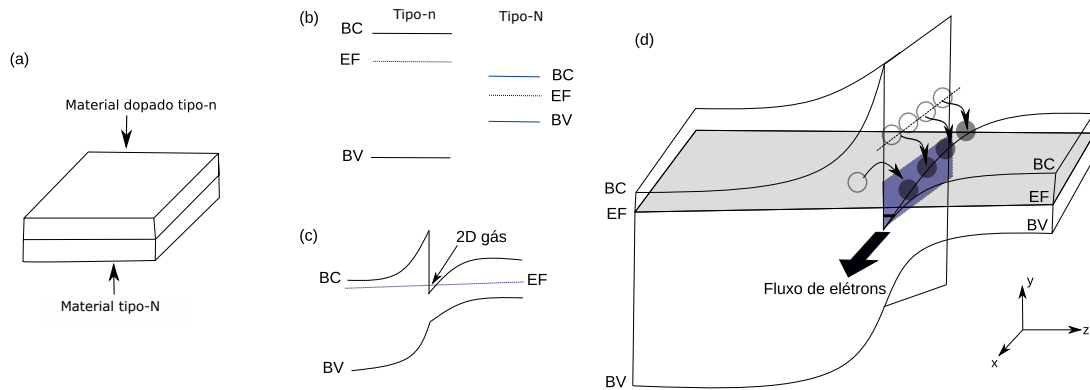


Figura 2 – Níveis de energia em heterojunções. (a) Representação de dois semicondutores um dopado tipo- $n$  e outro não. Em (b) temos dois semicondutores separados formando uma heteroestrutura. BC e BV representação respectivamente as bandas de condução e a banda de valência, e EF o nível de Fermi. (c) Alinhamento das bandas de energia dos dois semicondutores em equilíbrio numa heterojunção. (d) Representação 3D do esquema do item (c).

A é do tipo- $n$  e o semiconductor B do tipo-N. Os semicondutores têm que ser eletricamente neutros em suas interfaces e os níveis de Fermi, que são definidos pela dopagem dos materiais, devem se igualar para que não haja corrente na ausência de tensão externa aplicada e isso só ocorre se as bandas se curvarem para manter a neutralidade de carga, Fig. 2(c). Essa curvatura é devido as cargas espaciais que deslocam do lado  $n$  para o lado N (BARNHAM; VVEDENSKY, 2001). O processo que ocorre aqui é que o elétron é excitado dentro da banda de condução do semiconductor  $n$  se deslocam pelo semiconductor. Este movimento faz com que alguns elétrons cheguem a cruzar para o outro semiconductor  $N$ . Ao passarem do lado  $n$  para o lado  $N$ , os elétrons não conseguem voltar devido a barreira que surge devido a junção. Note que agora há uma separação entre portadores positivos e negativos, isto gera um potencial eletrostático que tende a direcionar os elétrons de volta para o semiconductor não dopado (DAVIES, 1998).

A energia total que terá o elétron é a soma da energia devido a descontinuidade da BC e a energia devido ao potencial eletrostático. A configuração das bandas de energia é parecido com o que ocorre nas junções p-n, incrementando a descontinuidade da BC. Dito isto, podemos voltar nossa atenção para essa descontinuidade, porque ela tem um papel importante no sistema, pois ela é responsável por impedir que o campo elétrico retorne os elétrons aos seus doadores. O que ocorre é que os elétrons irão colidir com a interface e lá ficarão presos em um poço aproximadamente triangular. Os níveis de energia desses portadores são quantizados ao longo do eixo  $z$  parecido com o que ocorre em um poço quadrado e, por vezes, apenas o mais baixo nível é ocupado (AMORESI, 2018). Então, os elétrons continuam tendo mobilidade nas direções  $x$ - $y$ , porém, estão restringidos ao mesmo estado de movimento em  $z$ . Quando os elétrons

se comportam desta maneira são chamados de gás de elétrons bidimensionais (2DEG, do inglês *Two-Dimensional Electron Gas*)(BARNHAM; VVEDENSKY, 2001; DAVIES, 1998).

### 1.3 Semicondutores, metais e isolantes

Uma das formas de identificar um material é analisando a sua capacidade de permitir a passagem de corrente elétrica, o quão esse material é resistente, ou não, a capaz de transportar carga elétrica. Podemos analisar a resistividade de um material, ou seja, o quanto esse material se opõe ao fluxo da corrente elétrica pela sua relação com a condutividade através da seguinte equação

$$\rho = \frac{1}{\sigma}, \quad (1.1)$$

onde  $\rho$  e  $\sigma$  são a resistividade e condutividade elétrica, respectivamente. Como a resistência do material é inversamente proporcional a condutividade, temos que quanto maior a condutividade menor será sua oposição a passagem de corrente. É dessa forma que podemos classificar os semicondutores, metais e isolantes. Essa característica também está relacionada com últimos níveis de energia ocupados pelos portadores no estado fundamental, temperatura  $T = 0$  K, que, basicamente, é estudar o preenchimento da última banda de energia (COSTA, 2011).

A forma como pode-se estudar o preenchimento das bandas de energia é através da função de Fermi

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_f)/K_B T}}, \quad (1.2)$$

que fornece a probabilidade de um estado de energia  $E$  estar ocupado por um elétron livre (ROGERS *et al.*, 2014), onde  $K_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura em Kelvin e  $E_f$  é o nível de Fermi. O nível de Fermi é o parâmetro importante para prever o comportamento elétrico do material (DIMITRIJEV, 2012). Note que na Eq. (1.2) quando consideramos  $T = 0$  K todos os estados abaixo do nível de Fermi encontram-se ocupado. Entretanto, para os níveis acima de  $E_f$  a possibilidade de ocupação é nula. Com isso, a medida que a temperatura aumenta, os elétrons podem ganhar energia suficiente para ocupar estes estados acima do nível de Fermi (ROGERS *et al.*, 2014). A última banda que está completamente preenchida é chamada de banda de valência (BV) e, para a primeira banda seguinte, que pode estar ou não ocupada, chamamos de banda de condução (BC). A diferença entre o mínimo da banda de condução e o máximo da

banda de valência é conhecida como *gap* (COSTA, 2011). A Fig. 3 mostra a relação da BV, BC e *gap* com as categorias condutores, semicondutores e isolantes considerando  $T = 0$  K.

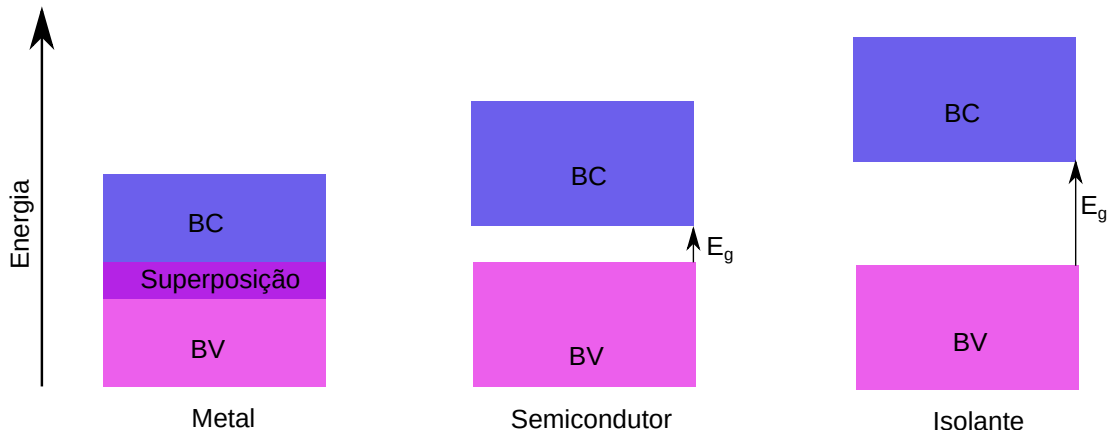


Figura 3 – Diagramas de bandas típicos para (a) metais, (b) semicondutores, e (c) isolantes a 0 K.

Nos condutores, mais conhecidos como metais, há uma sobreposição de bandas, de tal forma que os elétrons da BV podem saltar para a BC com muita facilidade, precisando de pouca energia, ou, simplesmente com a aplicação de um campo elétrico, como mostra a Fig. 3(a). Já nas Figs. 3(b) e 3(c), temos a representação esquemática para os semicondutores e isolantes. Essas duas estruturas têm em comum que suas BV's estão completamente preenchidas e suas BC's estão vazias. O que difere uma da outra é a largura do *gap*, onde o *gap* de um material isolante é bem maior que o do semicondutor, de maneira que para tirar um elétron da BV para a BC do semicondutor é necessário uma menor energia comparado com um isolante (CALLISTER *et al.*, 2012). Um ponto relevante que podemos abordar é que, a ausência do elétron na BV quando excitamos ele para a BC, irá se comporta como um portador de carga positivo, de tal forma que interage com o elétron por via potencial Coulumbiano (COSTA, 2011).

Sobre os semicondutores, podemos citar o silício (Si) e o germânio (Ge) como semicondutores intrínsecos mais conhecidos, ambos se encontram no grupo 14 da tabela periódica. Temos também elementos compostos que se comportam como semicondutores intrínsecos, como a união de elementos do grupo 13 com os elementos do grupo 15, com por exemplo o arseneto de gálio (GaAs) e o antimoneto de índio (InSb) (HOUSECROFT; SHARPE, 2012).

#### 1.4 Heteroestruturas semicondutoras

Heteroestrutura é um sistema onde materiais de composições ou estruturas distintas partilham da mesma interface, que chama-se de heterojunção. Essa interface é entre qualquer

material no estado sólido, que estão incluídas as estruturas cristalinas e amorfas de materiais tanto semicondutores, condutores e isolantes (MOURÃO *et al.*, 2012; ZHANG *et al.*, 2008; KONG *et al.*, 2012). A heteroestrutura de um semicondutor depende do *band gap*, da afinidade eletrônica e das posições relativas das camadas de condução e de valência dos semicondutores que constituem esse sistema. Com essa configuração é possível controlar vários parâmetros fundamentais na área da tecnologia que envolve semicondutores, por exemplo, mobilidade efetiva dos portadores de carga e índice de refração (MONIZ *et al.*, 2015).

Por estarmos tratando de junção com materiais diferentes, os *gaps* de energia entre os materiais são geralmente diferentes, que por consequência as bandas de condução e valência nestes sistemas geram degraus de potencial para elétrons e buracos. Na Fig. 4 temos a representação de uma junção de dois materiais semicondutores intrinsecamente diferentes onde pode-se perceber a formação do degrau de potencial de altura  $V_e$  para o elétron da camada de condução, e  $V_h$  para o buraco da banda de condução. Essas alturas são conhecidas como *band offsets* (WANG; STERN, 1985).

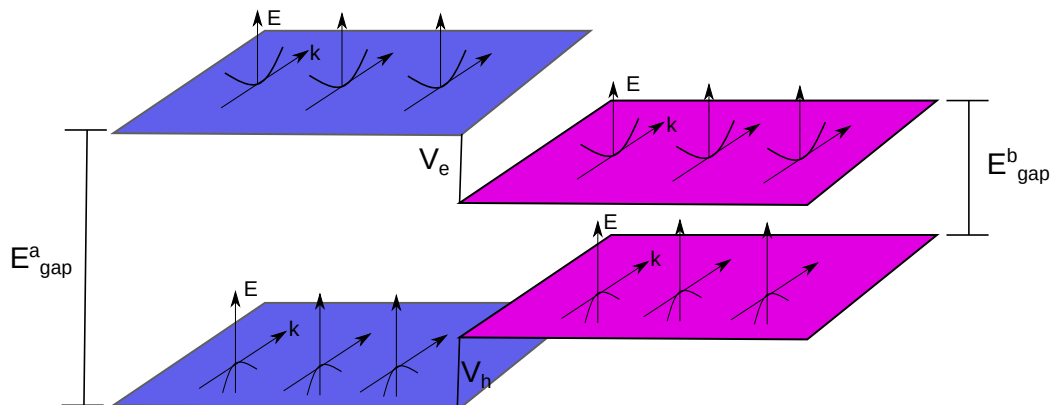


Figura 4 – Representação de uma heterojunção entre dois semicondutores intrinsecamente distintos com  $E_{gap}^B$  e  $E_{gap}^W$  diferentes, sendo  $V_e$  e  $V_h$  as alturas dos degraus de potencial da banda de condução e valência, respectivamente (CHAVES, 2007).

As heteroestruturas são classificadas em tipo-I e tipo-II. Essa distinção pode ser observada analisando a Fig. 4. Quando construímos uma heterojunção onde um material de *gap* menor  $E_{gap}^W$  cresce entre duas camadas de outro material com um maior *gap*  $E_{gap}^B$ , aparece poços ou barreiras de potencial para os portadores. Se no alinhamento das bandas ocorrer o surgimento de um poço potencial tanto para os elétrons (círculo azul) quando para os buracos (círculo aberto), teremos uma estrutura do tipo-I, representado na Fig. 5(a). Entretanto, quando ocorre de aparecer uma barreira de potencial para um portador e um poço de potencial para o outro, de tal forma que o elétron e o buraco estão em regiões espaciais diferentes do espaço,

temos a estrutura do tipo-II, como mostrado na Fig. 5(b).

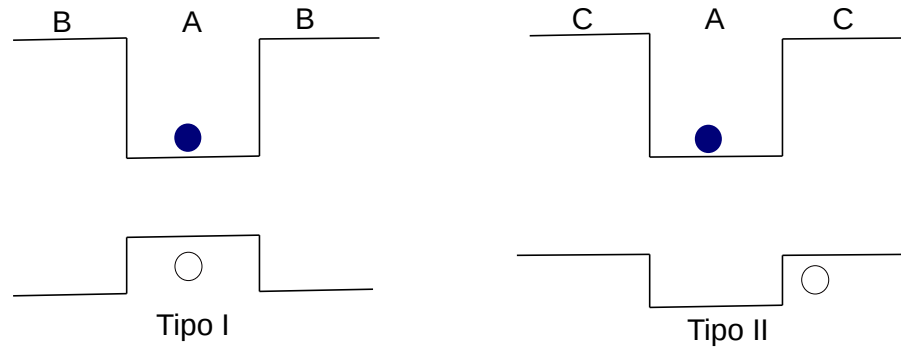


Figura 5 – Representação esquemática do compartimento das bandas de condução e de valência gerado por uma heteroestrutura do (a) tipo-I e do (b) tipo-II.

A obtenção experimental das heteroestruturas foi possível devido a evolução, nos anos 1970, das técnicas de crescimento de cristais. Podemos citar as duas técnicas mais conhecidas que são a epitaxia de feixe molecular (MBE, do inglês *Molecular Beam Epitaxy*) e a deposição de vapor químico metal-orgânico (MOCVD, do inglês *Metal-Organic Chemical Vapor Deposition*) (SILVA, 2008). Esses métodos possibilitaram depositar camadas atômicas individuais, de tal forma que novas configurações cristalinas de finas camadas fossem formadas por diferentes materiais semicondutores, pois até por volta de 1960 os dispositivos semicondutores eram baseados em materiais do tipo bulk (COSTA, 2011).

Essa área rendeu Prêmio Nobel em 2000 para Zhores I. Alferov e Herbert Kroemer, que foram os pioneiros no desenvolvimento de heteroestruturas em dispositivos de alta velocidade e em optoeletrônica, dando continuidade o trabalho de R. Tsu e L. Esaki (ESAKI; TSU, 1970), que estudaram o transporte eletrônico em superredes. Alguns anos depois, em 1974, foram publicados os primeiros trabalhos experimentais das heteroestruturas (ESAKI; CHANG, 1974). Outro trabalho bem interessante foi o de Nick Serpone e Michael Gratzel em 1984 (SERPONE *et al.*, 1984). Em seu trabalho eles acoplaram dois materiais semicondutores, o dióxido de titânio,  $\text{TiO}_2$ , e o sulfeto de cádmio,  $\text{CdS}$ , e foi notado como as cargas fotogeradas, elétrons  $e^-$  e buracos  $h^+$ , se separaram diminuindo assim a taxa de recombinação entre elas. Neste caso, os  $e^-$  fotogerados na banda de condução do  $\text{CdS}$  pela absorção de energia são transferidos para a banda de condução do  $\text{TiO}_2$ , enquanto os  $h^+$  fotogerados permanecem na banda de valência do  $\text{CdS}$ . Neste processo, há uma separação espacial entre o par elétron/buraco que, consequentemente, ocasiona o aumento do tempo de vida deles. Outros trabalhos foram publicados alguns anos depois com heteroestruturas constituídas de  $\text{Si/SiGe}$  (ALESHKIN; BEKIN, 1997) e com  $\text{AlAs/GaAs}$

(ANDO *et al.*, 2004).

## 1.5 Confinamento Quântico

Como foi visto, o surgimento de um potencial de confinamento em uma heteroestrutura é devido ao desalinhamento das bandas de condução e de valência na direção de crescimento da estrutura. Podemos citar dois efeitos bem evidentes devido a este confinamento nas nanoestruturas semicondutoras: (i) reduz os graus de liberdade do sistema de tal forma que os portadores de carga são confinados em uma pequena região do espaço na ordem de nanômetros ou, até mesmo, menor que isto; (ii) afeta diretamente no espectro de energias permitidas, tornando-as discretas na direção de crescimento da heteroestruturas. Podemos notar a diferença deste segundo ponto com os espectros de energia dos materiais *bulk*, onde seus portadores tem liberdade de locomoção nas três direções e que seu espectro de energia é quase-contínuo (COSTA, 2011).

O confinamento dos elétrons e dos buracos pode ocorrer em uma, duas e três dimensões. A relação do confinamento com as heteroestruturas está no número de graus de liberdade  $D_l$  ou, de forma proporcional, ao número de graus de confinamento  $D_c$  dos portadores de carga. Na Tabela 1 temos a correlação entre  $D_l$  e  $D_c$  com os sistemas quânticos.

Tabela 1 – Sistemas de dimensionalidade reduzida e seus respectivos números de graus de liberdade  $D_l$  e de confinamento  $D_c$ .

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

Como já foi citado, os portadores de carga de um semicondutor do tipo *bulk* pode se locomover em qualquer direção, ou seja, seu grau de liberdade é  $D_l = 3$ , com isso não possui nenhum grau de confinamento  $D_c = 0$ . No caso do poço quântico, os elétrons e buracos não podem se mover na direção de crescimento do material, logo, só possui um grau de confinamento  $D_c = 1$  e tem mobilidade em duas dimensões  $D_l = 2$ . Para o caso do fio quântico, temos que os portadores só podem se mover ao longo do eixo de crescimento do material, então só tem um grau de liberdade  $D_l = 1$  e é limitado em dois eixos, isto é,  $D_c = 2$ . Por último, temos o caso do ponto quântico, que é limitado nas 3 dimensões, isto é,  $D_c = 3$  e não contém nenhum grau de liberdade, logo  $D_l = 0$ . Observe que a relação entre o grau de liberdade e o confinamento

obedece a equação  $D_l + D_c = 3$ .

O resultado de restringir os portadores em semicondutores de baixa dimensionalidade está na relação energia-momento que se torna diferente, que, por consequência, ocasiona uma nova densidade de estados em comparação com o caso *bulk*, como mostrado na Fig. 6.

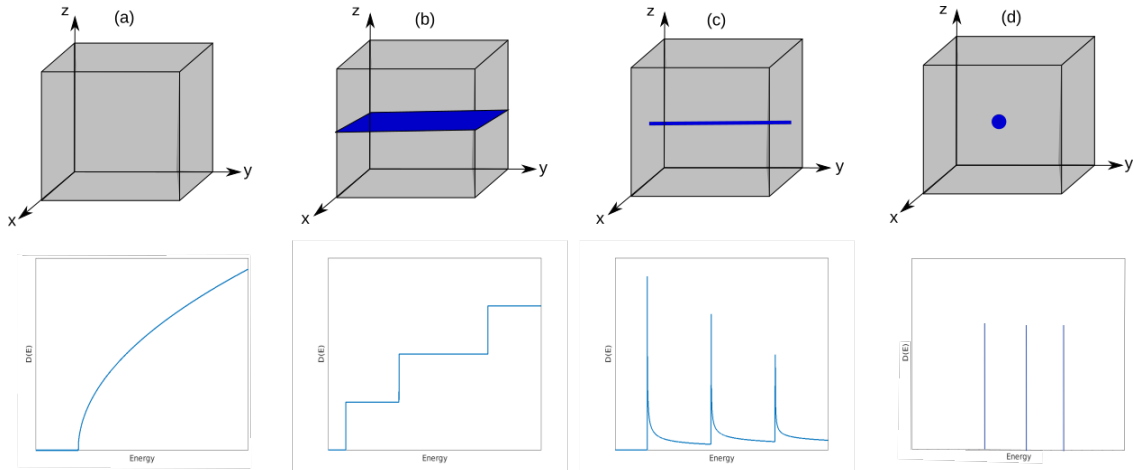


Figura 6 – Representação esquemática (em cima) e densidade de estados (em baixo) para portadores com diferentes dimensionalidades: (a) *bulk*, (b) poço quântico, (c) fio quântico, e (d) ponto quântico (ALMEIDA, 2016).

Observe que a medida que se reduz a dimensionalidade, a densidade deixa de ser contínua, ou quase-contínua, e se torna quantizada. Assim como os elétrons em um átomo, no caso dos pontos quânticos, os portadores de carga ocupam um conjunto específico de níveis de energia. Devido a isto, os pontos quânticos são conhecidos como átomos artificiais (ALMEIDA, 2016).

## 1.6 Fio quântico

Como mostrado na seção de confinamento quântico, a Tabela 1 fornece a informação de que para fabricarmos fios quânticos temos que encontrar técnicas de confinar os portadores de carga em duas dimensões. Com desenvolvimento de técnicas de crescimento de cristais, como a deposição vapor-liquido-sólido (VLSD, do inglês *Vapor Liquid Solid Deposition*) e microscopia de força atômica (AFM, do inglês *Atomic Force Microscopy*), essas estruturas semicondutoras unidimensionais em nanoescala puderam ser construídas. Essas estruturas têm ganhado muita atenção por ser facilmente manipulados quimicamente, como também por sua grande aplicabilidade em diversos meios eletrônicos (BJÖRK; AL., 2002; BARTICEVIC; AL., 2003; STANESCU *et al.*, 2014).

Um dos primeiros trabalhos experimentais utilizou da fotolitografia holográfica para a produção de fios quânticos de aproximadamente 300-400 Å de largura a partir de um único poço quântico de 100Å de InGaAs, como mostrado na Fig. 7(a) a representação do sistema, a fotografia de microscópio eletrônico de varredura (SEM, do inglês *Scanning electron microscope*) de alta resolução e a dimensão em escala do sistema (MILLER; AL., 1989). Outra maneira de criar fios quânticos é padronizando o substrato antes do seu crescimento. Isso resulta na formação de fios quânticos com sulcos em formato de V. Essa nanoestrutura em forma de V pode ser vista através da microscopia eletrônica de transmissão de varredura de campo escuro anular de alto ângulo (HAADF-STEM, do inglês *high-angle annular dark-field scanning transmission electron microscopy*) de uma nano-crista InP típica, conforme mostrado na Fig. 7(b). A resolução desses fios foi abordada por (GANGOPADHYAY; NAG, 1997).

Por meio dessas técnicas, tem-se surgido alguns tipos de fios quânticos formados por dois materiais semicondutores; o primeiro tipo é o *core-shell* que é um fio de um material coberto por uma camada de outro material. O *core-multishell* é o segundo tipo e é um fio de um material coberto por uma sequência de camadas de outros materiais, ver Fig. 7(c) (LAUHON; AL., 2002). Também tem-se os fios com heteroestruturas longitudinais, ver Fig. 7(d) (CHOI; AL., 2003).

Há outra forma de construir fios quânticos que é utilizando de pontas metálicas separadas por uma distância  $d$  para aprisionar o sistema, que até então é 2D, em mais uma dimensão, formando assim o fio quântico, como mostrado na Fig. 8(a) (SUN; AL., 1995). Na Fig. 8(b) temos outro experimento desse sistema em que podemos observar um fio quântico na ordem de escala de 200 nm visto através SEM (KIM; AL., 2001). Alguns estudos teóricos utilizaram essa modelagem e investigaram como o fio quântico interfere nos estados dos portadores de carga. Um desses estudos mostrou a existência de estados confinados de férmions sem massa em um fio quântico de grafeno (JR; AL., 2006). Outro estudo analisou a aplicação de um fio quântico rotacionado em relação aos eixos cristalográficos de uma monocamada anisotrópica na presença de campos externos. Tal estudo mostrou que tanto a rotação do fio com reação aos eixos cristalográficos como a aplicação de campos externos interferem diretamente no espectro de energia da nanoestrutura semicondutora (CUNHA; AL., 2020). Este último caso será melhor abordado no Cap. 3.



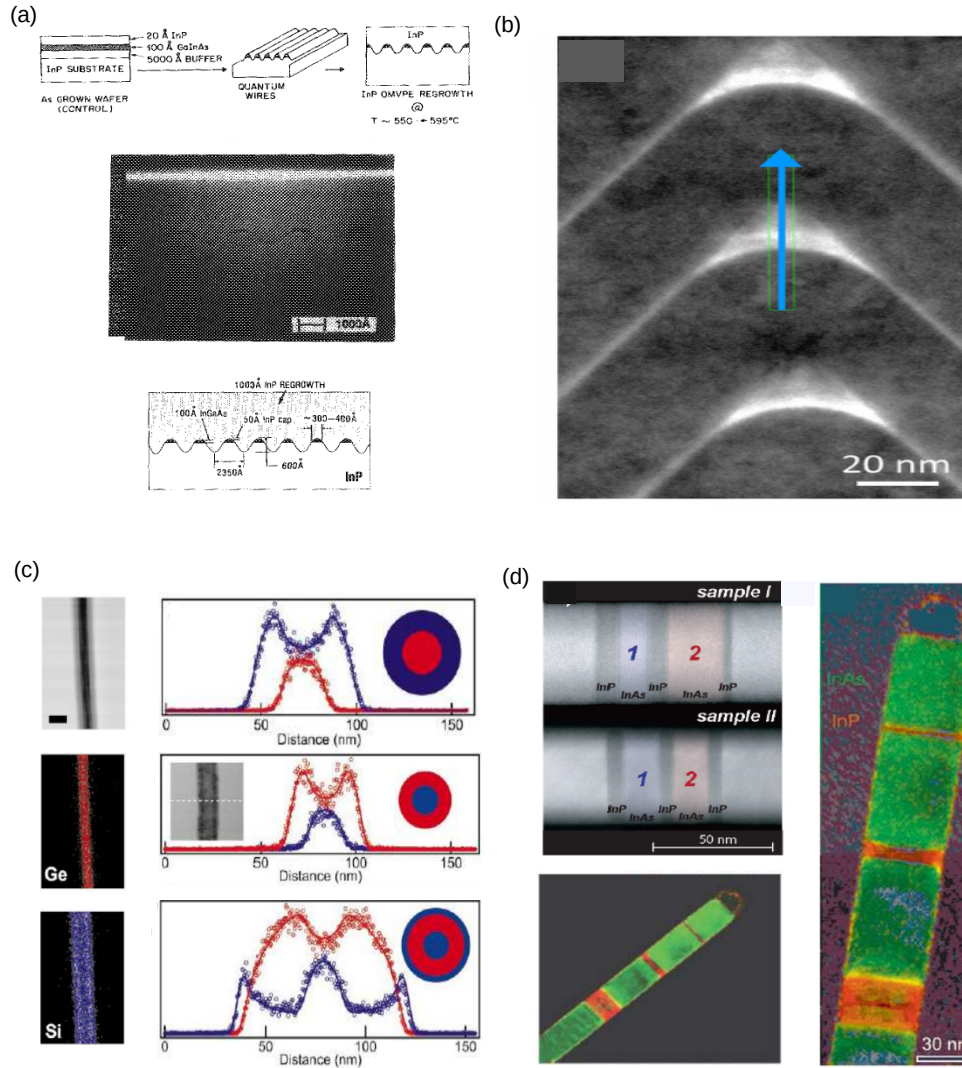


Figura 7 – Representações de estilos de fios quânticos. (a) Fios quânticos construídos através de fotolitografia holográfica de aproximadamente 300-400 Å de largura a partir de um único poço quântico de 100 Å de InGaAs (MILLER; AL., 1989). (b) Fios quânticos com sulcos em formato de V visto através da HAADF-STEM (GANGOPADHYAY; NAG, 1997). (c) Representação de fios quânticos heteroestruturados do tipo *core-shell* e *core-multishell*. (d) Representação de fios quânticos heteroestruturados longitudinais (CHOI; AL., 2003).

## 1.7 Aproximação da massa efetiva

Nesta seção vamos abordar como os portadores de carga se comportam na presença de uma campo elétrico externo. Sabemos que o elétron pode ser descrito como um pacote de onda que se movimenta com a velocidade de grupo

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}. \quad (1.3)$$

Como a energia do elétron é descrita como  $E = \hbar\omega$ , podemos rescrever a Eq. (1.3) tal como

$$\frac{\partial E}{\partial k} = \hbar v_g. \quad (1.4)$$

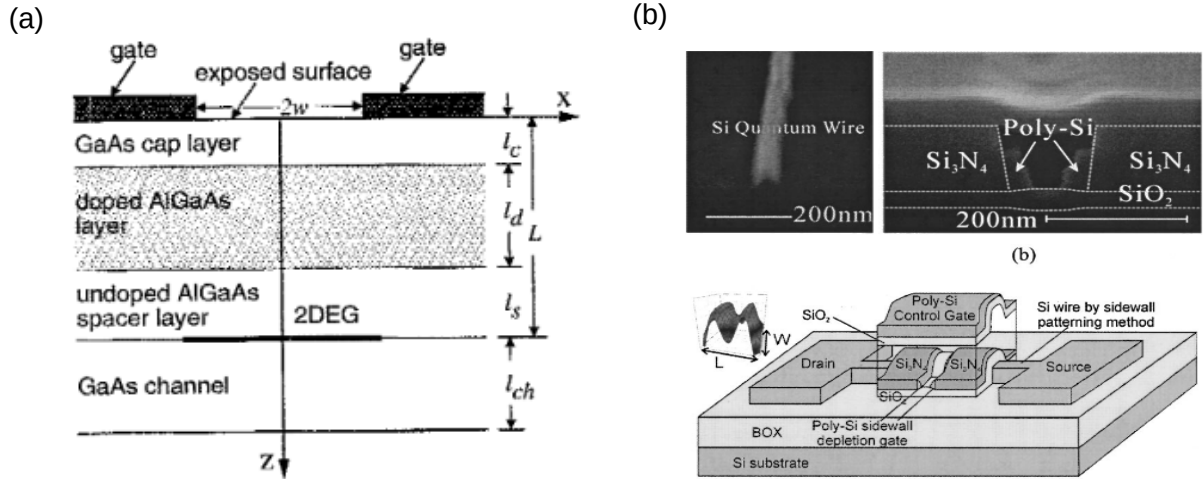


Figura 8 – Representações de estilos de fios quânticos definidos eletrostaticamente. (a) Fios quânticos construídos utilizando pontas metálicas separadas por uma distância  $d$  para aprisionar o sistema, que até então é 2D, em mais uma dimensão, formando assim o fio quântico (SUN; AL., 1995). Em (b) temos outro experimento desse sistema e que podemos ver o fio quântico na ordem de escala de 200 nm visto através SEM (KIM; AL., 2001).

Na presença de um campo elétrico externo, a energia do elétron varia de  $dE = Fdx$ , sendo  $F$  a força elétrica associada e  $dx$  o deslocamento. Desta forma, substituindo esta equação na Eq. (1.4), temos que

$$Fdx = \hbar v_g dk. \quad (1.5)$$

Como a variação do deslocamento é  $dx = v_g dt$ , podemos escrever:

$$F = \hbar \frac{dk}{dt}. \quad (1.6)$$

Note que a Eq. (1.6) representa a segunda lei de Newton para o elétron submetido a uma força elétrica  $F$  com momento  $\hbar k$ . Derivando a velocidade de grupo [Eq. (1.4)] em função do tempo, podemos exprimir a aceleração do elétron como

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \hbar^{-1} \frac{\partial^2 E}{\partial k \partial t} = \hbar^{-1} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \frac{dk}{dt}, \quad (1.7)$$

e igualando com a equação  $F = ma$ , obtêm-se que

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2}. \quad (1.8)$$

Observe que, sob a ação de uma força externa, a partícula no cristal comporta-se semelhante a um elétron livre, porém, agora com uma massa efetiva. Essa massa agora depende da derivada segunda da energia em relação ao número de onda, ou seja, é diretamente relacionada com a curvatura da relação de dispersão, que pode ser obtida, nos sólidos, através da estrutura de bandas.

Tabela 2 – Massas efetivas dos elétrons em alguns semicondutores (KITTEL, 2016).

Semicondutores	$\mu/m_e$
InAs	0,026
InP	0,073
GaSb	0,047
GaAs	0,067

Há casos, onde a massa efetiva do elétron pode ser maior ou menor que a massa do elétron, que são consequências das suas interações com a rede cristalina e com os demais elétrons. Em alguns casos, essa massa pode ser negativa quando tratamos de buracos (MACHADO, 2019). Na Tabela 2 listamos algumas massas efetivas de alguns semicondutores em relação a massa do elétron  $m_e$ .

Vale ressaltar que a energia não depende somente do módulo do vetor de onda, mas também da direção de  $\vec{k}$ . Consequentemente, a massa efetiva também irá depender dessa direção. Então, em termos gerais, a massa efetiva é uma grandeza tensorial e não escalar, representado por uma matriz cujo os elementos  $\alpha\beta$  é dado por

$$m_{\alpha\beta}^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_\alpha \partial k_\beta}. \quad (1.9)$$

Quando a energia não depende da direção do vetor  $\vec{k}$ , temos o caso de um sistema isotrópico, como mostra a Fig. 9(a). Entretanto, o nosso trabalho é sobre semicondutores anisotrópicos. Dessa maneira, a massa do elétron do nosso sistema depende da direção de  $\vec{k}$ , como visto na Fig. 9(b), isto é, dentro da aproximação parabólica temos parábolas diferentes em direções diferentes. No exemplo da Fig. 9(b), tem-se que as parábolas representadas por linhas pontilhadas com concavidades diferentes se ajustam melhor apenas em uma das direções, nos permitindo encontrar dentro dessa aproximação as massas  $m_x$ , ao longo do caminho  $\Gamma - X$ , e  $m_y$ , ao longo do caminho  $\Gamma - Y$ .

O fósforo negro (BP, sigla em inglês para *black phosphorus*) é um dentre um conjunto de materiais anisotrópicos 2D, como o GeSe, GeS, GeP (YANG; AL., 2; LI; AL., 2018), e alguns dicalcogenetos de metais de transição (TMDs, sigla em inglês para *Transition Metal Dichalcogenides*), como por exemplo, o dissulfeto de rênio ( $ReS_2$ ), e o disseleneto de rênio ( $ReSe_2$ ) (GE; AL., 2015; JARIWALA; AL., 2016). Dentre os TMDs anisotrópicos, o material que mais tem se destacado é o  $ReS_2$ , que é um exemplo do grupo VII-TMDs. Duas de suas variadas propriedades são: (I) é mecanicamente flexível e interage fortemente com a luz incidente, o que pode levar a uma maior absorção de fótons e geração de pares elétron-buraco, e (II) enquanto as

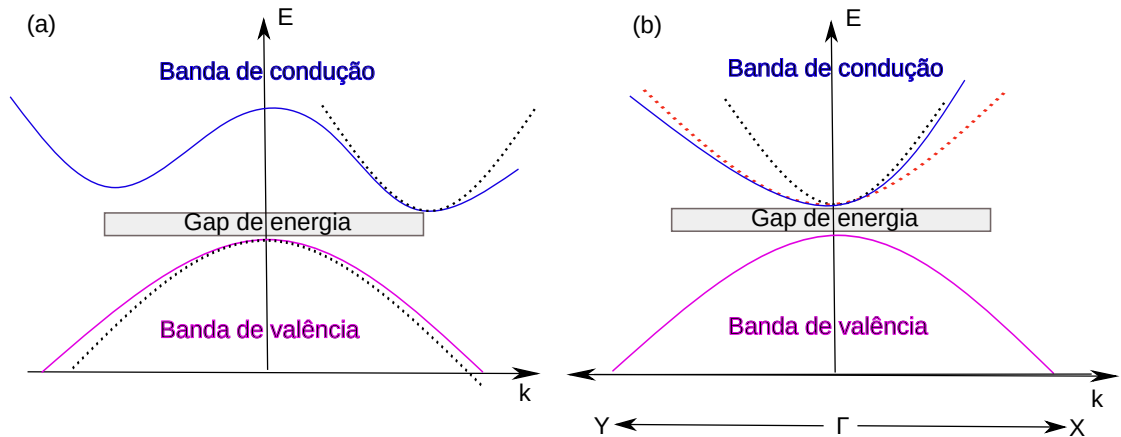


Figura 9 – (a) Estrutura de bandas de um semiconductor qualquer, destacando as bandas de condução (azul) e valência (lilás). O fundo da banda de condução e o topo da banda de valência são aproximados por relações de dispersões parabólicas. (b) Ilustração de estruturas de bandas de um semiconductor anisotrópico, sendo aproximado via método da massa efetiva por parábolas com diferentes concavidades ao longo das diferentes direções: uma para a direção  $x$  ( $\Gamma - X$ , pontilhado preto) e uma para a direção  $y$  ( $\Gamma - Y$ , pontilhado vermelho).

propriedades ópticas e optoeletrônicas de semicondutores de camadas 2D dependem do número de camadas e das mudanças na simetria como consequência dos efeitos de confinamento quântico na direção fora do plano, o ReS<sub>2</sub> mostra propriedades optoeletrônicas quase independentes do número de camadas (RAHMAN *et al.*, 2017). A Fig. 10 apresenta alguns semicondutores anisotrópicos 2D, caracterizando-os por suas potenciais aplicações e propriedades físicas.

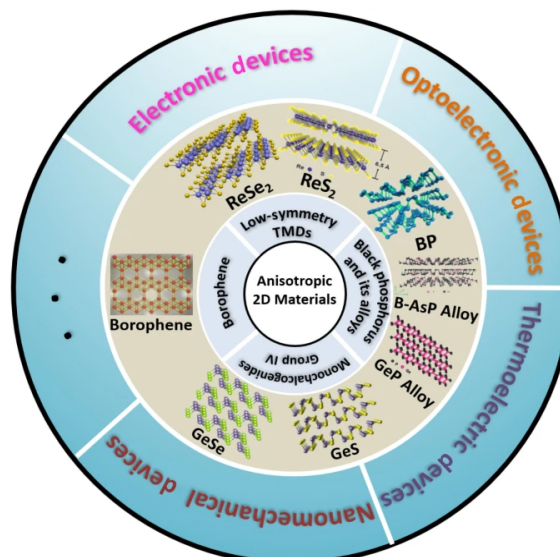


Figura 10 – Exemplos de materiais 2D anisotrópicos, ilustrando suas classificações, estruturas cristalinas e aplicações práticas para diferentes dispositivos. Figura adaptada da Ref. (ZHAO; AL., 2021).

Na Tabela 3 exemplificamos algumas massas efetivas de alguns semicondutores

Tabela 3 – Exemplos de materiais semicondutores anisotrópicos e seus valores de massas efetivas para o elétron ao longo das diferentes direções cristalográficas (CUNHA; AL., 2020; DAI; ZENG, 2015; YANG; AL., 2020).

Semicondutor	$m_x/m_0$	$m_y/m_0$
BP	1,01	0,19
As	0,23	1,22
TiS3	1,47	0,41
GeS	0,23	0,55
GeSe	0,15	0,25

anisotrópicos em relação a massa do elétron  $m_e$ .

### 1.8 Níveis de Landau

Para estudarmos o efeito do campo magnético em sistemas quânticos, vamos partir da equação de Schrödinger dado um certo Hamiltoniano do sistema. Para um elétron livre temos que  $V(\mathbf{r}) = 0$ . Portanto, o Hamiltoniano é escrito como

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*}, \quad (1.10)$$

sendo  $m^*$  a massa efetiva. Quando o elétron está na presença de um campo magnético  $\mathbf{B}$ , temos que fazer a seguinte substituição

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}, \quad (1.11)$$

onde  $\mathbf{A}$  é o potencial vetor, e  $q$  é a carga do elétron  $-e$ . Portanto, o Hamiltoniano pode ser reescrito como

$$H = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m^*}. \quad (1.12)$$

Sabemos que  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$  estão relacionados por  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ . Isso implica que para um dado campo magnético, temos uma liberdade na escolha do potencial vetor. Essa afirmação pode ser entendida observando-se que sempre podemos tomar a transformação de calibre  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi$ , sendo  $\chi$  uma função escalar qualquer, e ainda assim manter  $\mathbf{B}$  inalterado. As funções de onda do sistema são diferentes quando tomamos potenciais vetores  $\mathbf{A}$  diferentes, porém os observáveis do sistema não devem mudar sob esta transformação de calibre.

Assumindo que o campo magnético se encontra ao longo do eixo  $z$ ,  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ , e escolhendo o calibre de Landau  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ , podemos reescrever Hamiltoniano (1.12) do

sistema como

$$H = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{1}{2m^*}(p_y + eBx)^2 + \frac{p_z^2}{2m^*}. \quad (1.13)$$

Observe que a Eq. (1.13) não depende de  $y$  e nem de  $z$ , de tal forma que  $[H, p_y] = [H, p_z] = 0$ . Isso significa que os momentos  $p_y$  e  $p_z$  são constantes do movimento, o que nos permite encontrar uma base comum de autofunções para  $H$ ,  $p_y$  e  $p_z$ , onde

$$\begin{cases} p_y \Psi = \hbar k_y \Psi, \\ p_z \Psi = \hbar k_z \Psi, \end{cases} \quad (1.14)$$

que são representações de ondas planas. Desta forma, temos que

$$\Psi(x, y, z) = e^{ik_z z} e^{ik_y y} \phi(x). \quad (1.15)$$

Substituindo a Eq. (1.15) e considerando  $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ , obtemos

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m^*} (\hbar k_y + eBx)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \right] \phi = E \phi, \quad (1.16)$$

ou seja,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m^* w_c^2}{2} (x - x_0)^2 \right] \phi = E' \phi, \quad (1.17)$$

sendo  $w_c = eB/m^*$  a frequência ciclotrônica,  $x_0 = -l_B^2 k_y$  com  $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$  sendo o comprimento magnético, e  $E' = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$ . Esta equação diferencial descreve um oscilador harmônico unidimensional deslocado. Portanto,

$$E' = \hbar w_c \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.18)$$

Dessa maneira, as energias permitidas para uma partícula carregada na presença de um campo magnético uniforme na direção  $z$  é

$$E_{n, k_z} = \hbar w_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}, \quad (1.19)$$

e a função de onda correspondente é

$$\Psi_{n, k_y, k_z}(x, y, z) = e^{ik_z z} e^{ik_y y} H_n \left( \frac{x - x_0}{l_B} \right) e^{-(x - x_0)^2 / 2l_B^2}, \quad (1.20)$$

sendo  $H_n$  os polinômios de Hermite (BELL, 2004). Note que  $k_y$  apareceu como um número quântico. Isso ocorre porque  $\langle x \rangle = x_0 = -l_B^2 k_y$ . Assim,  $k_y$  está conectado com a posição

em torno da qual o elétron descreve a órbita ciclotrônica. Espera-se que  $k_y$  esteja relacionado com a velocidade do elétron, porém, quando analisamos  $\langle p_y \rangle = \hbar k_y$  temos  $\langle m^* v_y \rangle = \langle p_y + eBx \rangle = \hbar k_y + eBx_0 = 0$ . Isto nos diz que o valor esperado da velocidade eletrônica é zero mesmo  $k_y \neq 0$ . Portanto,  $k_y$  não está mais relacionado com a velocidade do elétron, mas sim com o valor esperado da posição (JÚNIOR, 2014).

Observe também que  $k_y$  muda a posição na qual  $\Psi_n$  está centrada. Dessa maneira, para um dado valor de  $n$ , há vários  $\Psi_n$  com a mesma energia, já que podemos mudar o valor de  $k_y$  e obter vários estados degenerados. Estes estados degenerados são conhecidos como níveis de Landau.

Por fim, podemos analisar quantos estados apresentam uma mesma energia. Para isto, vamos tomar condições periódicas em  $y$ , de forma que  $k_y = 0, \pm 2\pi/L_y, \pm 4\pi/L_y \dots$ . Então, entre um centro de órbita e outro, temos

$$\Delta X_{k_y} = \left| \frac{-\hbar}{eB} \Delta k_y \right| = \frac{2\pi l_B^2}{L_y}, \quad (1.21)$$

onde  $\Delta X_{k_y}$  é a distância entre os centros das órbitas. Com isto, podemos calcular o número de estados em um nível de Landau preenchido para um determinado  $n$  através da razão

$$\frac{L_x}{\Delta X_{k_y}} = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2} = \frac{L_x L_y}{2\pi} \frac{eB}{\hbar}. \quad (1.22)$$

Pela equação acima, temos que cada estado tem uma relação com uma área de magnitude  $2\pi l_B^2$  no plano perpendicular ao campo magnético. Há também uma unidade de fluxo magnético, que podemos definir como  $\Phi_0 = 2\pi\hbar/q = h/q$  para cada área  $2\pi l_B^2$ . Então, observe que a degenerescência de Landau é determinada pela unidade de campo  $\Phi_0$  que atravessa o sistema. Portanto, concluímos que o número de estados em um nível de Landau preenchido para um determinado valor de  $n$  é o tamanho do sistema,  $L_x L_y$ , dividido pela superfície da órbita do ciclotron,  $2\pi l_B^2$ . Por fim, o número de estados por unidade de área  $n_B$  é (SILVA, 2008)

$$n_B = \frac{1}{2\pi l_B^2} = \frac{qB}{h}. \quad (1.23)$$

## 1.9 Escopo do trabalho

Considerando o contexto mencionado de sistemas de bicamadas de materiais anisotrópicos 2D e dos potenciais eletrostáticos do tipo fios quânticos, fomos motivados a investigar na presente dissertação o estudo das bandas de energias para um sistema de bicamada anisotrópica rotacionada. Posteriormente, aplicamos campos elétrico e magnético perpendiculares para avaliar

seus efeitos nos espectros de energia. Analisaremos também, nos próximos capítulos, o efeito da rotação e da largura do fio quântico em mono- e bicamada. Com o intuito de alcançar esses objetivos, estruturamos a dissertação da forma como será detalhada a seguir.

No Capítulo 2, iremos apresentar uma análise do comportamento dos espectros de energia e das isoenergias de uma bicamada 2D. Inicialmente, obteremos o Hamiltoniano e o espectro de energia para o caso isotrópico na presença de campos externos. Logo após, faremos a mesma análise para o caso anisotrópico. Por fim, expressaremos o Hamiltoniano de uma bicamada anisotrópica rotacionada em relação aos seus eixos cristalográficos, na presença de campos externos.

No Capítulo 3, iremos apresentar um estudo sobre as propriedades eletrônicas de fios quânticos semicondutores anisotrópicos. Aqui estudaremos como a rotação do fio quântico e a presença de um campo magnético perpendicular à monocamada interferem no espectro de energia, fazendo uma co-relação com os níveis de Landau. Após isso, analisaremos este mesmo sistema, mas considerando um campo magnético no plano.

No Capítulo 4, iremos investigar as propriedades eletrônicas de fios quânticos semicondutores anisotrópicos definidos em bicamadas rotacionadas. Consideraremos o Hamiltoniano desenvolvido no Capítulo 2 e adicionaremos o potencial eletrostático utilizado no Capítulo 3. Por fim, analisaremos como a relação de dispersão se modifica quando variamos o ângulo entre as camadas, o ângulo do fio quântico, e o campo magnético.



## 2 BICAMADA DE GÁS DE ELÉTRONS BIDIMENSIONAL ROTACIONADA SOB EFEITOS DE CAMPOS EXTERNOS

Neste capítulo iremos apresentar uma análise do comportamento do espectro de energia e das isoenergias de uma bicamada 2DEG. De início, analisaremos o caso de um sistema isotrópico, adicionando variáveis como a energia de acoplamento, campo elétrico e o campo magnético. Posteriormente, iremos fazer a mesma abordagem para o caso anisotrópico. Por fim, investigaremos o efeito da rotação entre as camadas 2DEG anisotrópica nas propriedades eletrônicas do sistema.

### 2.1 Bicamada de gás de elétrons bidimensionais isotrópicos

Nosso problema é composto por uma heteroestrutura formada por materiais diferentes, de tal forma que nas interfaces dessas junções serão formadas as monocamadas de materiais 2D. A Fig. 11(a) ilustra a formação da bicamada 2DEG. Na Fig. 11(b) representamos somente a estrutura da bicamada de 2DEG e será dessa forma que iremos representá-la durante o restante do trabalho. Observe que a distância  $d$  desse material vai depender da largura do material dopado. Esta distância não será tão grande de maneira que os elétrons de uma camada não interajam com os da outra camada, e nem muito pequeno para não gerar uma grande interferência entre as camadas. Dessa maneira, a interação entre uma camada e outra será representada pelo termo  $\Delta$ , que será definido como constante. O sistema está ainda imerso em um campo elétrico perpendicular ao plano das camadas fazendo assim a camada superior ter uma energia potencial  $U_1$  e a camada inferior  $U_2$ , como mostrado na Fig. 11(b).

O primeiro passo será construir o Hamiltoniano do sistema. Observando a Fig. 11, e levando-se em consideração que o sistema é isotrópico, temos que os Hamiltonianos que descrevem as camadas de cima e de baixo são, respectivamente, dados por

$$H_1 = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_1, \quad (2.1a)$$

$$H_2 = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_2, \quad (2.1b)$$

onde  $\nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2$  é o operador Laplaciano e  $m$  é a massa dos portadores de carga. Introduzindo a energia de acoplamento  $\Delta$  entre as camadas, podemos escrever o Hamiltoniano do sistema total

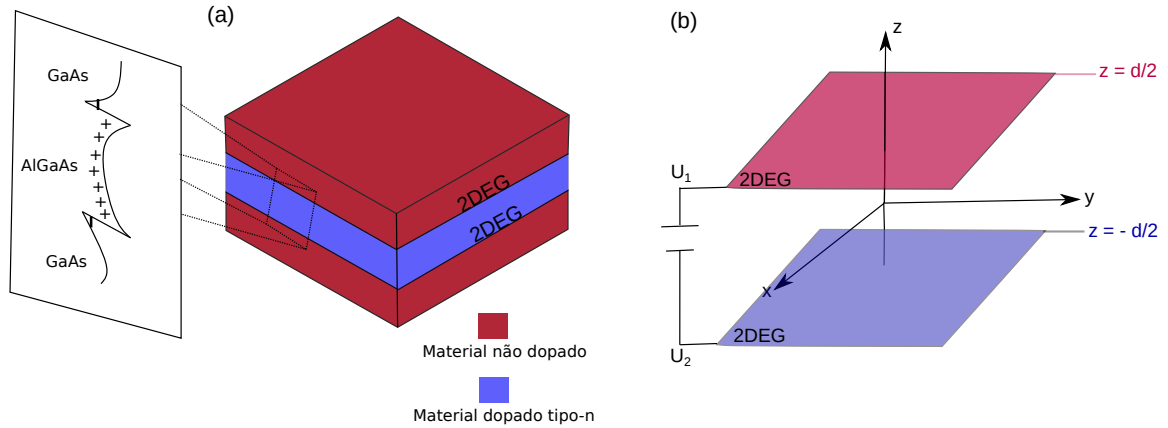


Figura 11 – Bicamada 2DEG submetida a um campo elétrico perpendicular. Em (a), tem-se a ilustração da formação da bicamada 2DEG através da heterojunção de dois materiais distintos. Em (b), apresenta-se a ilustração esquemática da estrutura de bicamada da forma como iremos dispor durante toda esta dissertação.

como

$$H = \begin{pmatrix} \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_1 & \Delta \\ \Delta & \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_2 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Definido o Hamiltoniano, vamos representar agora a função de onda, os nossos autovetores, da seguinte forma

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

onde  $\psi_1$  e  $\psi_2$  estão associados às amplitudes de probabilidade de se encontrar o elétron na camada de cima e na camada de baixo, respectivamente. Com as Eqs. (2.2) e (2.3) podemos escrever a equação de Schrödinger independente do tempo,  $H\psi = E\psi$ , como

$$\begin{pmatrix} \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_1 & \Delta \\ \Delta & \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Da Eq. (2.4), chegamos ao seguinte sistema de equações diferenciais acopladas

$$\begin{cases} \frac{-\hbar^2 \nabla^2 \psi_1}{2m} + U_1 \psi_1 + \Delta \psi_2 = E \psi_1, \\ \frac{-\hbar^2 \nabla^2 \psi_2}{2m} + U_2 \psi_2 + \Delta \psi_1 = E \psi_2. \end{cases} \quad (2.5)$$

Devido à invariância translacional do sistema nas direções  $x$  e  $y$ , podemos tomar a seguinte função de onda

$$\psi_j \longrightarrow \psi_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (2.6)$$

com os novos  $\psi_j$  sendo independentes de  $\vec{r} = (x, y)$ , e onde  $\vec{k} = (k_x, k_y)$ . Utilizando  $\nabla^2 \psi = -k^2 \psi$ , podemos reescrever a Eq. (2.5) como

$$\begin{cases} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi_1 + U_1 \psi_1 + \Delta \psi_2 = E \psi_1, \\ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi_2 + U_2 \psi_2 + \Delta \psi_1 = E \psi_2. \end{cases} \quad (2.7)$$

Com este sistema de equações, podemos analisar alguns casos como será discutido nas próximas subseções.

### 2.1.1 Na ausência de campos externos

No primeiro caso a ser analisado, consideramos que  $U_1 = U_2 = 0$ , ou seja, o sistema não está na presença do campo elétrico. Portanto, a Eq. (2.7) torna-se

$$\begin{cases} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) \psi_1 = -\Delta \psi_2, \\ \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) \psi_2 = -\Delta \psi_1. \end{cases} \quad (2.8)$$

Observe que da segunda equação do sistema acima, temos

$$-\frac{1}{\Delta} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) \psi_2 = \psi_1. \quad (2.9)$$

Substituindo a Eq. (2.9) na primeira equação do sistema (2.8), obtemos

$$-\frac{1}{\Delta} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) \psi_2 = -\Delta \psi_2, \quad (2.10)$$

que pode ser reescrita como

$$\left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \pm \Delta \right) \psi_2 = 0. \quad (2.11)$$

Dessa maneira, para que tenhamos uma solução não-trivial,  $\psi_2 \neq 0$ , chegamos às seguintes energias

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \Delta. \quad (2.12)$$

Observe que quando consideramos  $\Delta = 0$ , ou seja, sem interação entre as camadas, temos uma banda de energia duplamente degenerada com o formato de uma parábola,  $E \propto k^2$ , como está representado na Fig. 12(a). Porém, como podemos observar na Fig. 12(b), quando consideramos

o fator de acoplamento não nulo, temos uma quebra de degenerescência, onde uma banda de energia sofre um deslocamento de  $-\Delta$  enquanto a outra sofre um deslocamento de  $+\Delta$ , produzindo um *gap* de energia entre as bandas de  $2\Delta$ .

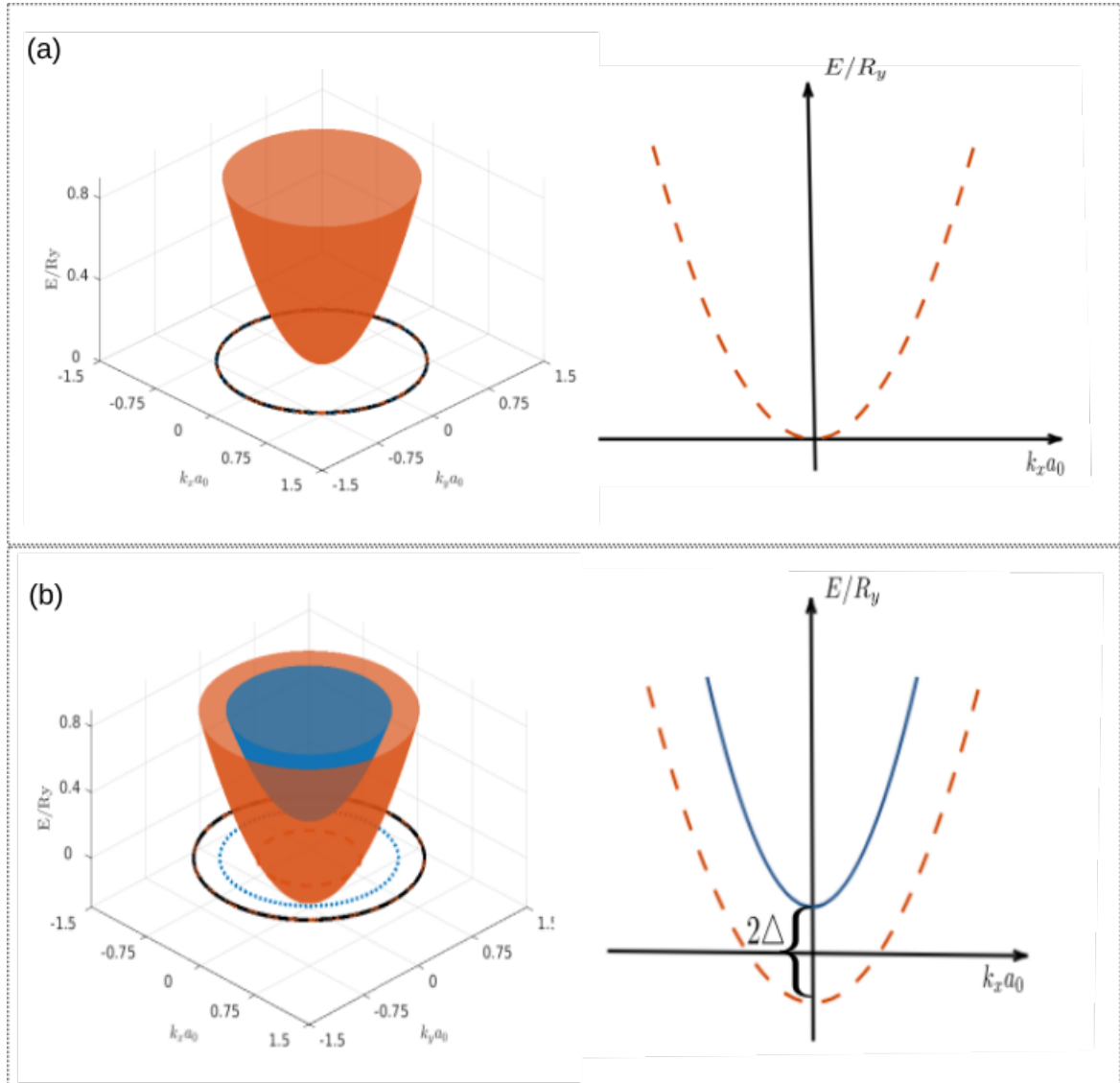


Figura 12 – (a) Espectro de energia para uma bicamada 2DEG desacoplada,  $\Delta = 0$ . Observe que temos bandas de energia degeneradas. (b) Note que ao considerar o fator de acoplamento,  $\Delta \neq 0$ , o sistema quebra a degenerescência. O *gap* de energia entre as bandas é de  $2\Delta$ . Os símbolos  $R_y$  e  $a_0$  representam a energia de Rydberg e o raio de Bohr, respectivamente. Temos a representação das bandas de energia tanto em 3D (à esquerda) como em 2D (à direita). A curva preta representa a isoenergia do sistema. Consideramos uma bicamada 2DEG isotrópica com a massa  $m/m_0 = 1.01$  (CUNHA; AL., 2020).

### 2.1.2 Na presença de campo elétrico perpendicular

No segundo caso, consideraremos a presença de um campo elétrico perpendicular às camadas, ou seja,  $U_1 \neq U_2 \neq 0$ . Definindo as quantidades

$$U_0 = \frac{U_1 + U_2}{2}, \quad \delta U = \frac{U_1 - U_2}{2}, \quad (2.13)$$

podemos reescrever a Eq. (2.4) como

$$\begin{pmatrix} \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_0 + \delta U & \Delta \\ \Delta & \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_0 - \delta U \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Seguindo os mesmos passos do primeiro caso estudado, podemos resolver a Eq. (2.14) e obter as seguintes energias para o sistema

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_0 \pm \sqrt{(\delta U)^2 + \Delta^2}. \quad (2.15)$$

Note que, o espectro de energia continua sendo em forma de parábola. Porém, com a contribuição do campo elétrico perpendicular as camadas, temos a introdução dos termos  $+U_0 \pm \sqrt{(\delta U)^2 + \Delta^2}$ , que causam um deslocamento das bandas de energia conforme ilustrado na Fig. 13. O *gap* de energia entre as bandas agora é de  $2\sqrt{(\delta U)^2 + \Delta^2}$ . No primeiro caso estu-

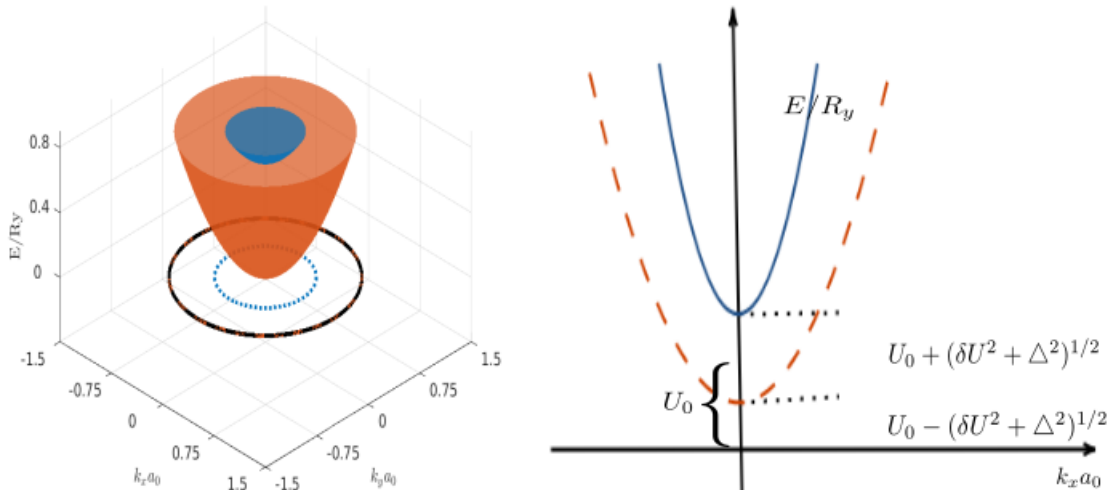


Figura 13 – Espectro de energia para uma bicamada 2DEG acoplada na presença de um campo elétrico perpendicular aos planos das camadas. O sistema não tem degenerescência e o *gap* de energia entre as bandas agora é de  $2\sqrt{(\delta U)^2 + \Delta^2}$ .

dado, quando não tínhamos o campo elétrico aplicado no sistema, a degenerescência do sistema

é quebrada pelo fator de acoplamento  $\Delta$ . Neste segundo caso, tomando  $\Delta = 0$ , a Eq. (2.15) tem a forma

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_0 \pm \delta U. \quad (2.16)$$

Lembrando que  $U_1 = U_0 + \delta U$  e  $U_2 = U_0 - \delta U$ , temos

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_1, \quad (2.17a)$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U_2. \quad (2.17b)$$

Assim, mesmo sem o fator de acoplamento entre as camadas, a degenerescência dos níveis de energia do sistema é quebrada devido ao campo elétrico aplicado, produzindo um *gap* de  $2\delta U$  entre as bandas de energia.

### 2.1.3 Na presença de um campo magnético no plano

Nessa seção, estudaremos uma bicamada formada por dois planos paralelos de 2DEG isotrópica que interagem entre si através de uma energia de acoplamento  $\Delta$ , separados por uma distância  $d$ , na presença de um campo elétrico perpendicular às camadas. Em adição iremos considerar ao sistema um campo magnético em uma direção arbitrária no plano, formando um ângulo  $\alpha_B$  com o eixo  $x$ , como mostra a Fig. 14.

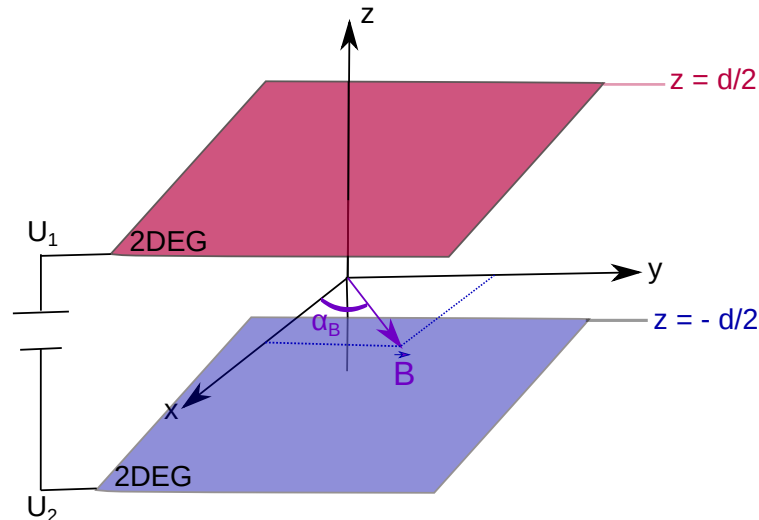


Figura 14 – Representação da bicamada de gás de elétrons bidimensionais na presença de um campo magnético com orientação arbitrária no plano  $xy$ .

O campo magnético no plano é descrito por

$$\vec{B} = B_0 \cos(\alpha_B) \hat{x} + B_0 \sin(\alpha_B) \hat{y}, \quad (2.18)$$

e está relacionado ao potencial vetor pela seguinte equação

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix}, \quad (2.19)$$

ou seja,

$$\vec{B} = \left( \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) \hat{x} + \left( \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \hat{y} + \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \hat{z}. \quad (2.20)$$

Assim, das Eqs. (2.18) e (2.20), temos que o potencial vetor é dado por

$$\vec{A} = (B_0 z \sin \alpha_B, -B_0 z \cos \alpha_B, 0). \quad (2.21)$$

Fazendo a seguinte substituição  $\vec{P} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$ , devido ao acoplamento mínimo, o termo cinético do Hamiltoniano  $P^2/2m$  torna-se

$$\frac{P^2}{2m} \rightarrow \frac{p^2 + (eB_0 z)^2 - 2eB_0 z(p_x \sin \alpha_B - p_y \cos \alpha_B)}{2m}. \quad (2.22)$$

Podemos ainda reescrever o potencial vetor como  $\vec{A} = B_0 z(\sin \alpha_B, -\cos \alpha_B) = B_0 z \hat{n}$ , onde  $\hat{n}$  é o versor ao longo da direção de  $\vec{A}$ . O campo magnético é perpendicular ao versor  $\hat{n}$ , já que o campo magnético é  $\vec{B} \perp \vec{A}$ . Com isso, a Eq. (2.22) pode ser escrita como

$$\frac{P^2}{2m} \rightarrow \frac{p^2 + (eB_0 z)^2 - 2eB_0 z(\vec{p} \cdot \hat{n})}{2m}. \quad (2.23)$$

Com a Eq. (2.23), podemos escrever o Hamiltoniano do sistema da seguinte maneira

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{eB_0 d(\vec{p} \cdot \hat{n})}{m} + \frac{e^2 B_0^2 d^2}{8m} + U_0 + \delta U & \Delta \\ \Delta & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{eB_0 d(\vec{p} \cdot \hat{n})}{m} + \frac{e^2 B_0^2 d^2}{8m} + U_0 - \delta U \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Resolvendo a equação de Schrödinger independente do tempo para o Hamiltoniano (2.24), obtemos o seguinte espectro de energias

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e^2 B_0^2 d^2}{8m} + U_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + \left( \frac{e\hbar B_0 d(\vec{k} \cdot \hat{n})}{2m} - \delta U \right)^2}. \quad (2.25)$$

Dessa maneira, as Eqs. (2.24) e (2.25) descrevem o Hamiltoniano e o espectro de energia, respectivamente, de uma bicamada 2DEG isotrópica acoplada, na presença de um campo elétrico perpendicular e de um campo magnético com orientação arbitrária no plano  $xy$ .

Agora, analisamos o caso em que o campo magnético está na direção  $\hat{y}$ ,  $\vec{B} = (0, B, 0)$ , ou seja,  $\alpha_B = \pi/2$ . Consequentemente, o potencial vetor está na direção  $\hat{x}$ ,  $\vec{A} = (Bz, 0, 0)$ , e as energias (2.25) são dadas por

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e^2 B_0^2 d^2}{8m} + U_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + \left( \frac{e\hbar k_x B_0 d}{2m} - \delta U \right)^2}, \quad (2.26)$$

onde  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ . Podemos agora analisar como se comporta o espectro de energia quando fazemos o momento não-nulo apenas na direção  $\hat{y}$ , ou seja,  $\vec{k} = (0, k_y, 0)$ . Portanto, a Eq. (2.26) se reduz a

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e^2 B_0^2 d^2}{8m} + U_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + (\delta U)^2}. \quad (2.27)$$

Observe que esta expressão de energia é similar a Eq. (2.15) com apenas o termo  $U_B = \left( \frac{e^2 B_0^2 d^2}{8m} \right)$  de diferença, onde  $U_B$  tem dimensão de energia e se deve ao campo magnético. Nesse caso, temos um espectro de energia com um formato parabólico deslocado positivamente, caso  $U_B > 0$ , como é mostrado na Fig. 25.

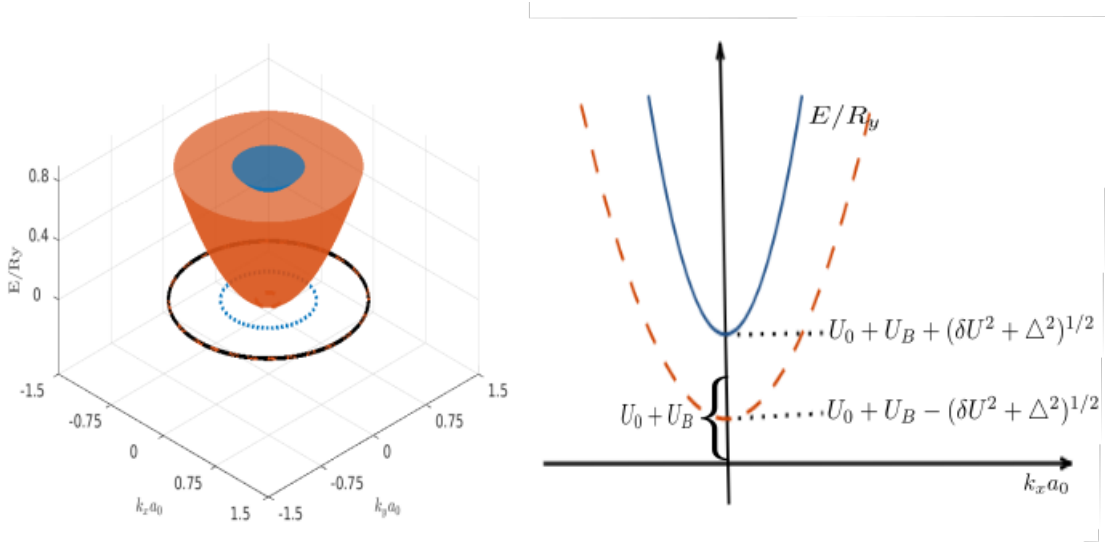


Figura 15 – Espectro de energia para uma bicamada 2DEG desacoplada na presença de um campo elétrico perpendicular aos planos e a um campo magnético no plano  $xy$ .

Agora, se considerarmos um momento não-nulo apenas na direção  $\hat{x}$ , ou seja,  $\vec{k} = (k_x, 0, 0)$ , e mantivermos  $\alpha_B = \pi/2$ , a Eq. (2.26) torna-se

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{e^2 B_0^2 d^2}{8m} + U_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + \left( \frac{e\hbar k_x B_0 d}{2m} - \delta U \right)^2}. \quad (2.28)$$

Para  $U_1 = U_2 = 0$  e  $\Delta = 0$ , obtemos

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left( |k_x| \pm \frac{e|B_0|d}{2\hbar} \right)^2. \quad (2.29)$$



Por outro lado, tomando  $\vec{k} = (0, k_y, 0)$ ,  $\alpha_B = 0$ ,  $U_1 = U_2 = 0$  e  $\Delta = 0$ , chegamos à

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left( |k_y| \pm \frac{e|B_0|d}{2\hbar} \right)^2. \quad (2.30)$$

Como vemos na Fig. 16, se tomamos  $U_1 = U_2 = 0$  e  $\Delta = 0$ , o espectro de energia sofre uma translação na coordenada  $k_x$  (se  $\alpha_B = \pi/2$ ) e  $k_y$  (se  $\alpha_B = 0$ ) devido ao termo  $eB_0d/2\hbar$ .

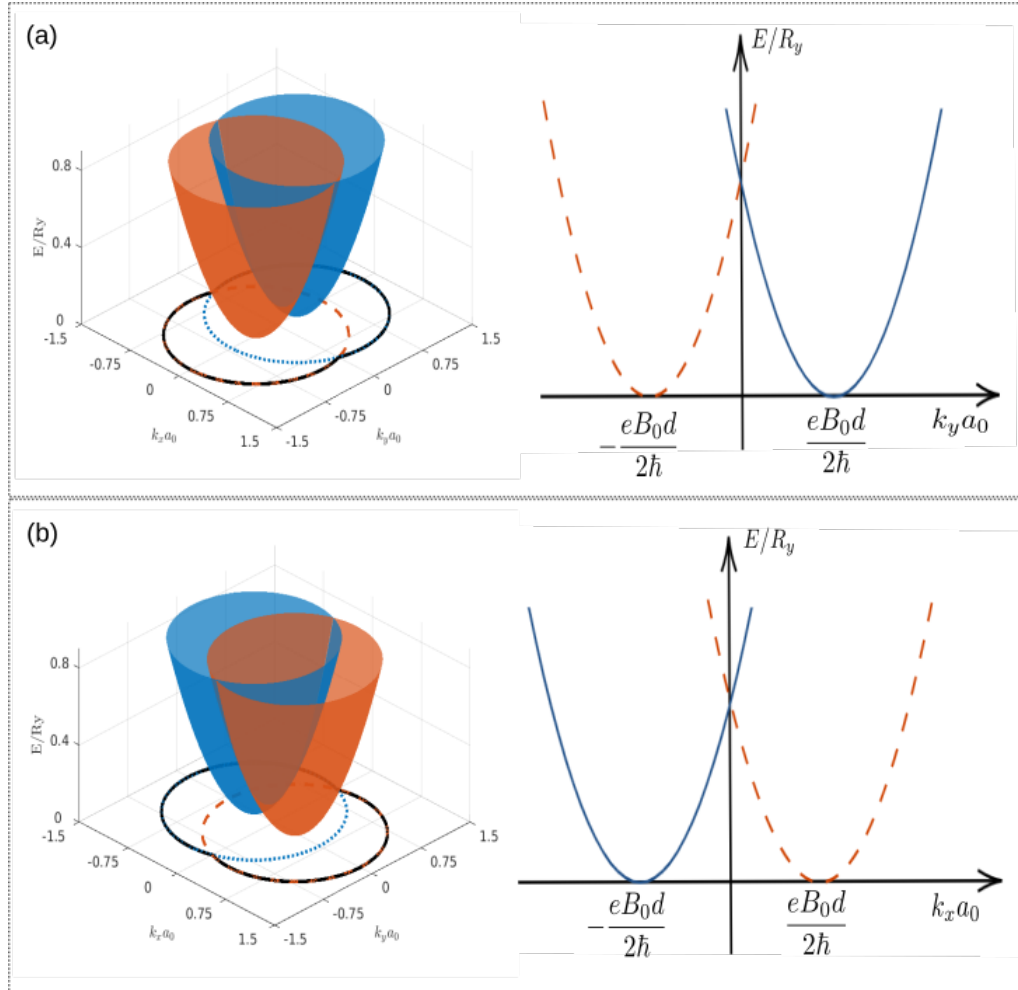


Figura 16 – Espectro de energia para uma bicamada 2DEG desacoplada na presença do campo magnético. Em (a) fixamos o campo magnético na direção  $\hat{x}$ ,  $\alpha_B = 0$ . Em (b) o campo magnético  $\hat{y}$ ,  $\alpha_B = \pi/2$ . Consideramos  $U_1 = U_2 = 0$  e  $\Delta = 0$ .

Caso tomemos  $U_0 = \Delta = 0$  e  $\delta U > 0$ , vemos que há um deslocamento tanto no eixo positivo quanto no eixo negativo para o espectro de energia e para a coordenada  $k_x$  (se  $\alpha_B = \pi/2$ ) e  $k_y$  (se  $\alpha_B = 0$ ), como mostrado nas Figs. 16(a) e 16(b), respectivamente. Note que ao rotacionarmos o campo magnético, o espectro de energia também rotaciona. Quando fazemos  $U_0 > 0$  e  $\delta U > 0$  o espectro também rotaciona quando rotacionamos o campo magnético, porém, o sistema agora é deslocado na escala de energia. Tal resultado pode ser visto na Fig. 17.

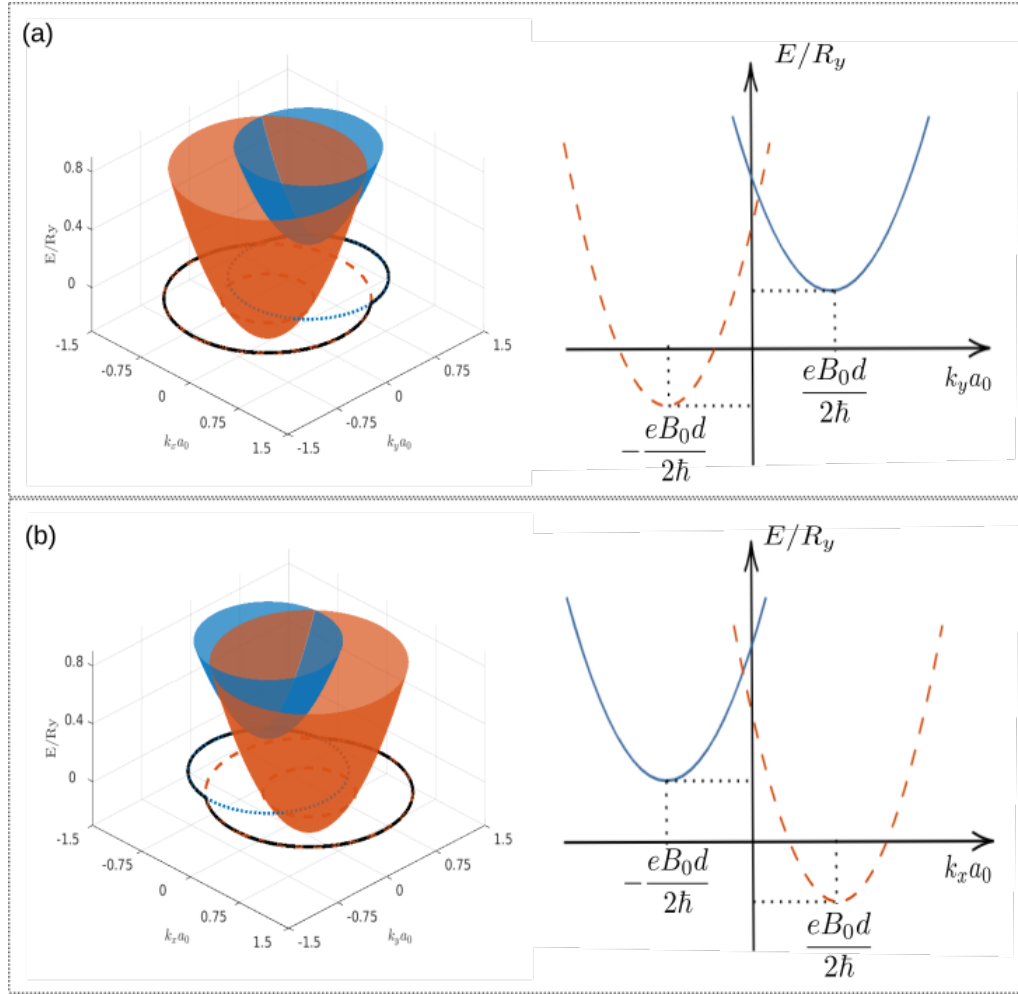


Figura 17 – Mesmas condições da Fig. 16, porém considerando  $\delta U \neq 0$ .

Observamos nessa seção como fatores externos (energia de acoplamento, campo elétrico perpendicular e campo magnético no plano) interferem no espectro de energia do sistema. Na próxima seção, iremos fazer essa mesma análise considerando um sistema anisotrópico.

## 2.2 Bicamada de gás de elétrons bidimensionais anisotrópicos

Nessa seção, iremos supor que o sistema é anisotrópico, ou seja, que as massas efetivas de cada uma das camadas que constituem o sistema dependem da direção. Desta forma, o Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = \begin{pmatrix} \frac{-\hbar^2 \nabla_x^2}{2m_x} + \frac{-\hbar^2 \nabla_y^2}{2m_y} + U_1 & \Delta \\ \Delta & \frac{-\hbar^2 \nabla_x^2}{2m_x} + \frac{-\hbar^2 \nabla_y^2}{2m_y} + U_2 \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

com  $U_1 = U_0 + \delta U$  e  $U_2 = U_0 - \delta U$ , como definido anteriormente. Resolvendo a equação de Schrödinger chegamos no seguinte sistema de equação

$$\begin{cases} \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} \psi_1 + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} \psi_1 + U_1 \psi_1 + \Delta \psi_2 = E \psi_1, \\ \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} \psi_2 + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} \psi_2 + U_2 \psi_2 + \Delta \psi_1 = E \psi_2. \end{cases} \quad (2.32)$$

### 2.2.1 Na ausência de campos externos

Primeiramente, analisemos o caso da ausência do campo elétrico,  $U_1 = U_2 = 0$ . Nesse caso, Eq. (2.32) se reduz a

$$\begin{cases} \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} \psi_1 + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} \psi_1 + \Delta \psi_2 = E \psi_1, \\ \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} \psi_2 + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} \psi_2 + \Delta \psi_1 = E \psi_2. \end{cases} \quad (2.33)$$

Da segunda equação do sistema acima, encontramos uma expressão para  $\psi_1$ , tal como

$$\psi_1 = -\frac{1}{\Delta} \left( \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} - E \right) \psi_2, \quad (2.34)$$

que ao substituirmos na primeira Eq. 2.33 do sistema, chegamos na seguinte expansão para as energias

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} \pm \Delta. \quad (2.35)$$

Note que agora, as isoenergias tem o formato de uma elipse em virtude das massas distintas nas diferentes direções, e que o termo de acoplamento  $\Delta$  quebra a degenerescência das camadas, tal qual no caso isotrópico, como ilustrado na Fig. 18.

### 2.2.2 Na presença de campo elétrico perpendicular

Considerando agora que o sistema está na presença de um campo elétrico, ou seja,  $U_1 \neq 0$ ,  $U_2 \neq 0$ , temos da Eq. (2.32) que

$$\psi_1 = -\frac{1}{\Delta} \left( \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} + U_2 - E \right) \psi_2. \quad (2.36)$$

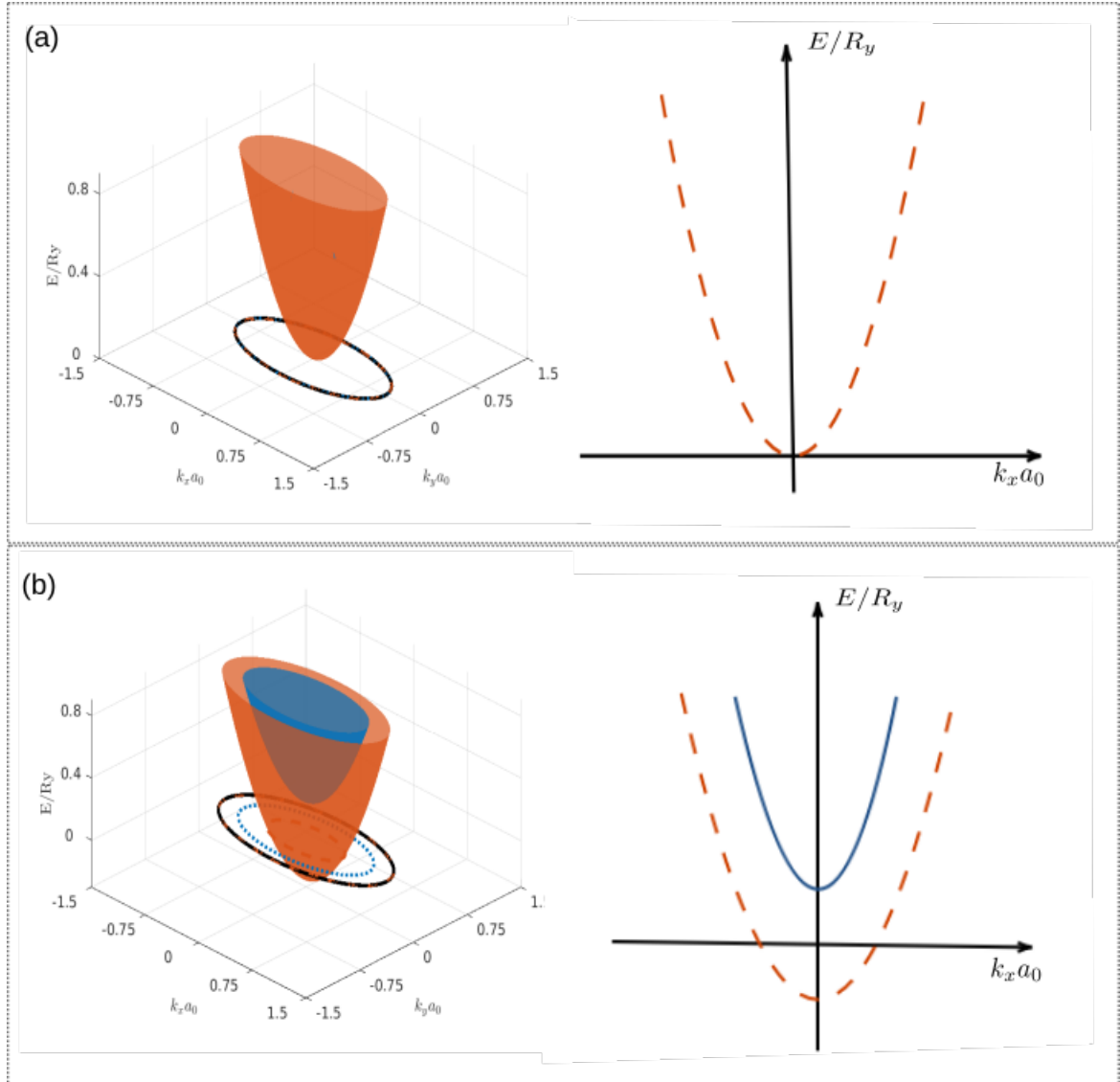


Figura 18 – Bicamada 2DEG anisotrópicos. (a) Bandas de energia para a bicamada de 2DEG tomando  $\Delta = 0$ . as bandas são degeneradas. (b) As bandas de energia apresentam uma quebra da degenerescência quando consideramos  $\Delta \neq 0$ . Os símbolos  $R_y$  e  $a_0$  representam a energia de Rydberg e o raio de Bohr, respectivamente. Temos a representação das bandas de energia tanto em 3D como em 2D. A curva preta representa a isoenergia do sistema. Consideramos uma bicamada anisotrópica de fosforeno com as massas  $m_x/m_0 = 1.01$  e  $m_y/m_0 = 0.19$  (CUNHA; AL., 2020).

Substituindo a Eq. (2.36) na primeira equação do sistema (2.32), obtemos as seguintes energias

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} + U_0 \pm \sqrt{(\delta U)^2 + \Delta^2}. \quad (2.37)$$

Estas energias são parecidas com as da Eq. (2.15), porém, são válidas para o caso anisotrópico. A Fig. 19 mostra que as isoenergias do sistema são elipses, e que a presença do campo elétrico, mesmo sem o fator de acoplamento, causa a quebra de simetria de inversão das camadas e consequentemente a quebra da degenerescência das bandas de energia.

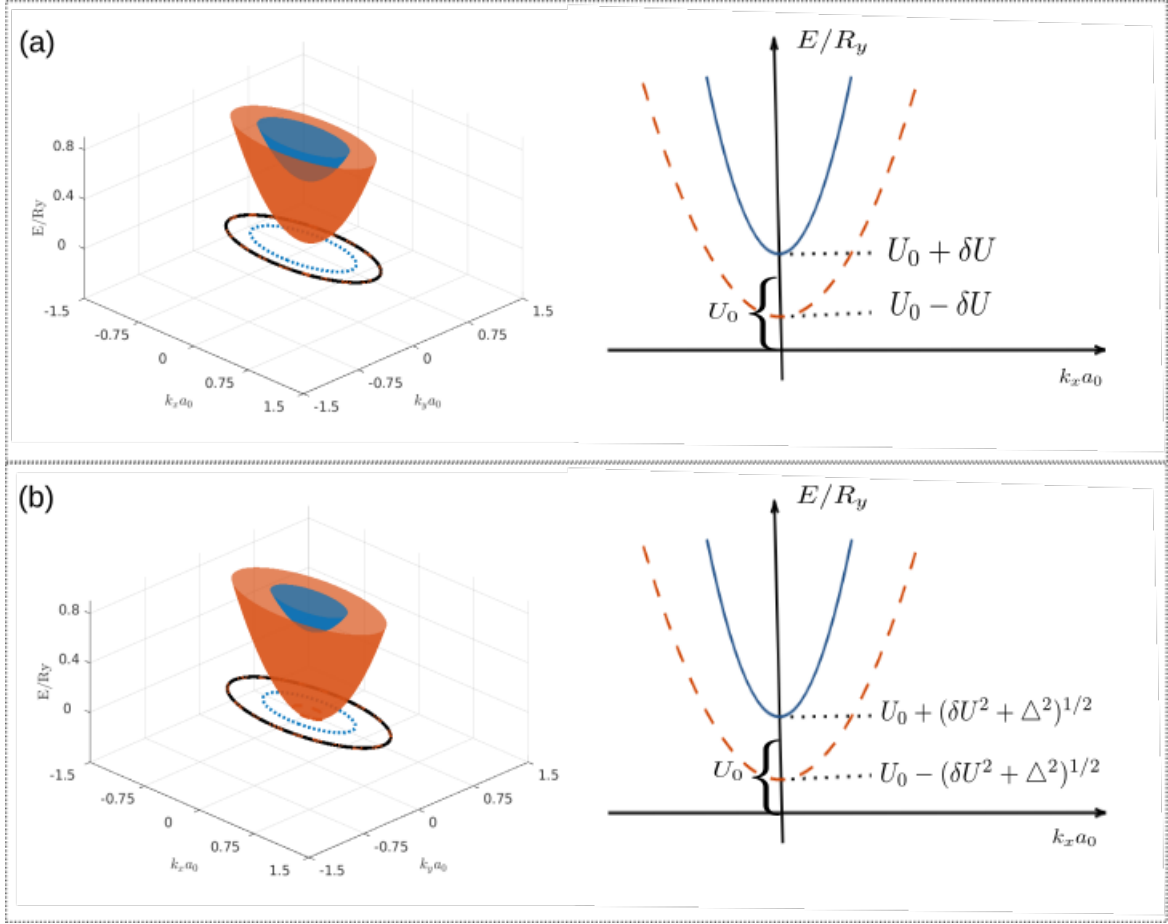


Figura 19 – Bicamada de gás de elétrons bidimensionais anisotrópicos na presença do campo elétrico. Em (a) temos a quebra da degenerescência das bandas por causa do campo elétrico  $\delta U \neq 0$  aplicado, mesmo considerando  $\Delta = 0$ . Em (b) vemos que quando consideramos  $\Delta \neq 0$  e  $\delta U \neq 0$  a quebra da degenerescência foi mais acentuada.

### 2.2.3 Na presença de um campo magnético no plano

Nessa subseção, incluiremos o efeito de um campo magnético no plano. Dessa maneira, devemos tomar a transformação  $\vec{P} \longrightarrow \vec{p} - e\vec{A}$ . Assim, temos que

$$\frac{(P_x)^2}{2m_x} \longrightarrow \frac{1}{2m_x}(p_x - eA_x)^2 = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} - \frac{\hbar k_x e B_0 z}{m_x} \sin \alpha_B + \frac{e^2 B_0^2 z^2}{2m_x} \sin^2 \alpha_B, \quad (2.38a)$$

$$\frac{(P_y)^2}{2m_y} \longrightarrow \frac{1}{2m_y}(p_y - eA_y)^2 = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} - \frac{\hbar k_y e B_0 z}{m_y} \cos \alpha_B + \frac{e^2 B_0^2 z^2}{2m_y} \cos^2 \alpha_B. \quad (2.38b)$$

Com isso, podemos escrever o Hamiltoniano para as camadas de cima e de baixo, respectivamente, como

$$H_1|_{z=+d/2} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} + \frac{\hbar e B_0 d}{2} \left( \frac{k_y \cos \alpha_B}{m_y} - \frac{k_x \sin \alpha_B}{m_x} \right) + \frac{e^2 B_0^2 d^2}{8} \left( \frac{\sin^2 \alpha_B}{m_x} + \frac{\cos^2 \alpha_B}{m_y} \right) + U_1, \quad (2.39a)$$

$$H_2|_{z=-d/2} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} - \frac{\hbar e B_0 d}{2} \left( \frac{k_y \cos \alpha_B}{m_y} - \frac{k_x \sin \alpha}{m_x} \right) + \frac{e^2 B_0^2 d^2}{8} \left( \frac{\sin^2 \alpha_B}{m_x} + \frac{\cos^2 \alpha_B}{m_y} \right) + U_2. \quad (2.39b)$$

Portanto, o Hamiltoniano do sistema total é dada por

$$H = \begin{pmatrix} H_1|_{z=d/2} & \Delta \\ \Delta & H_2|_{z=-d/2} \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Diagonalizando a Eq. (2.40), encontramos as seguintes bandas de energia do sistema

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} \pm \sqrt{\Delta^2 + \left[ \delta U + \frac{\hbar e B_0 d}{2} \left( \frac{k_y \cos \alpha_B}{m_y} - \frac{k_x \sin \alpha_B}{m_x} \right) \right]^2} + U_0 + \frac{e^2 B_0^2 z^2}{2} \left( \frac{\sin^2 \alpha_B}{m_x} + \frac{\cos^2 \alpha_B}{m_y} \right). \quad (2.41)$$

Na Fig. 20, mostramos as energias do sistema considerando  $U_{1,2} = \Delta = 0$  e duas direções de campo magnético. Na Fig. 20(a), temos o campo na direção  $\hat{x}$ , isto é, com  $\alpha_B = 0$ . Na Fig. 20(b), fixamos o campo magnético na direção  $\hat{y}$ , tal que  $\alpha_B = \pi/2$ . Note que a presença do campo magnético translada o sistema na direção de  $k$ .

Na Fig. 21 fizemos  $\Delta = 0$  e  $\delta U \neq 0$ , resultando tanto em uma translação na direção  $k$ , como em um *shift* no espectro de energia. Na Fig. 21(a) temos o campo magnético na direção  $\hat{x}$  e na Fig. 21(b) temos o campo magnético na direção  $\hat{y}$ . Na Fig. 22, mostramos algumas relações de dispersão tomando  $\Delta \neq 0$ . Observe que ao considerar a interação entre as camadas há a quebra da degenerescência do sistema, ou seja, as bandas de energia não se cruzam. Mesmo no caso onde o campo elétrico é desconsiderado, Figs. 22(a) e 22(b), como no caso que há campo elétrico, Figs. 22(c) e 22(d), as bandas de energia não se tocam.

Concluimos nessa subseção que as bandas de energias de um sistema anisotrópico têm o mesmo comportamento das bandas de energia do sistema isotrópico, porém, ao invés de termos espectros parabólicos, temos agora espectros em formato de elipsóides com isoenergias no formato elíptico.

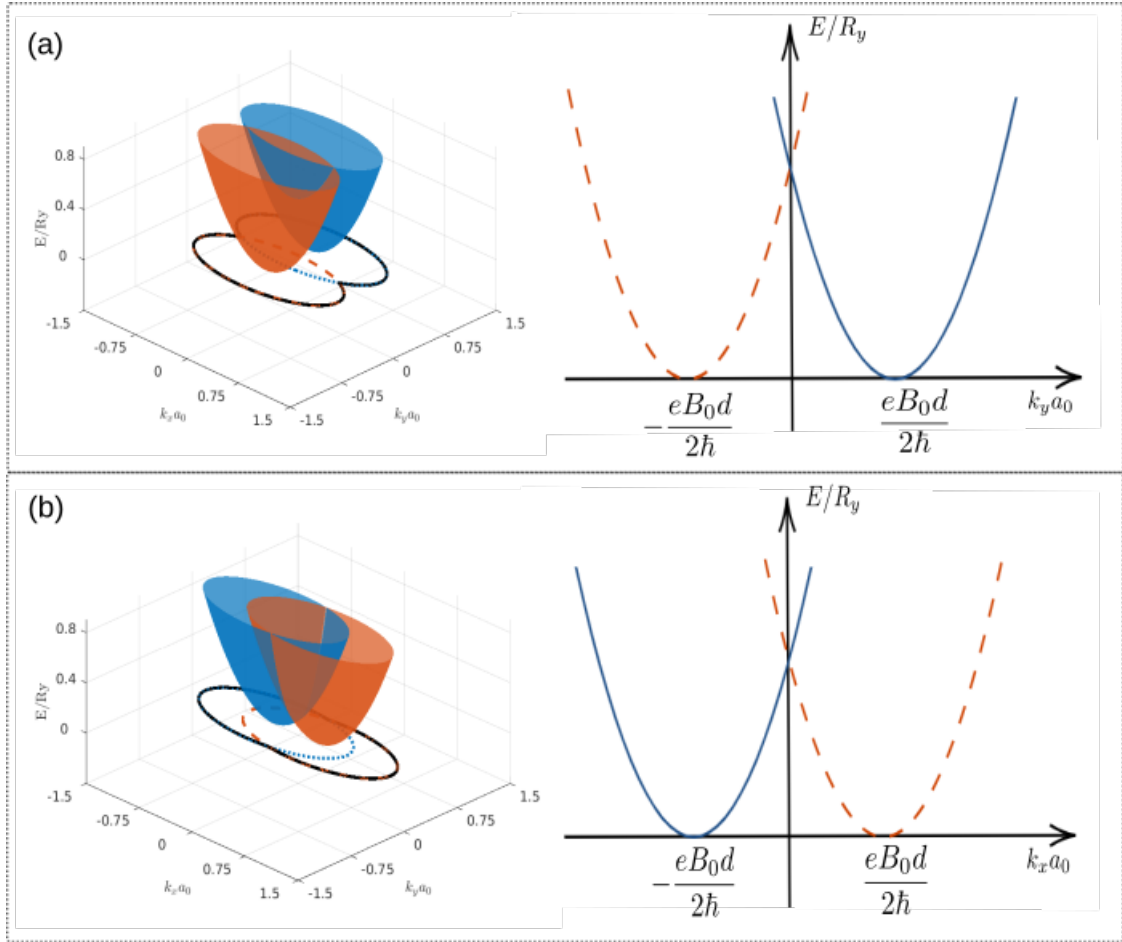


Figura 20 – Bicamada 2DEG anisotrópica desacoplada na presença do campo magnético no plano. Consideramos  $\Delta = 0$  e  $U_{1,2} = 0$  e tomamos a direção do campo magnético tal que (a)  $\alpha_B = 0$  e (b)  $\alpha_B = \pi/2$ .

### 2.3 Bicamada de gás de elétrons bidimensionais anisotrópica rotacionada na presença de um campo elétrico perpendicular e um campo magnético no plano

Nessa seção vamos considerar os mesmos sistemas das seções anteriores, porém, considerando agora que a bicamada está rotacionada com um ângulo  $\theta$  em relação aos eixos cristalográficos, como é mostrado na Fig. 23. O Hamiltoniano do sistema será representado como

$$H(k', k'') = \begin{pmatrix} H_1|_{z=d/2}(k'_x, k'_y) & \Delta \\ \Delta & H_2|_{z=-d/2}(k'_x, k'_y) \end{pmatrix}, \quad (2.42)$$

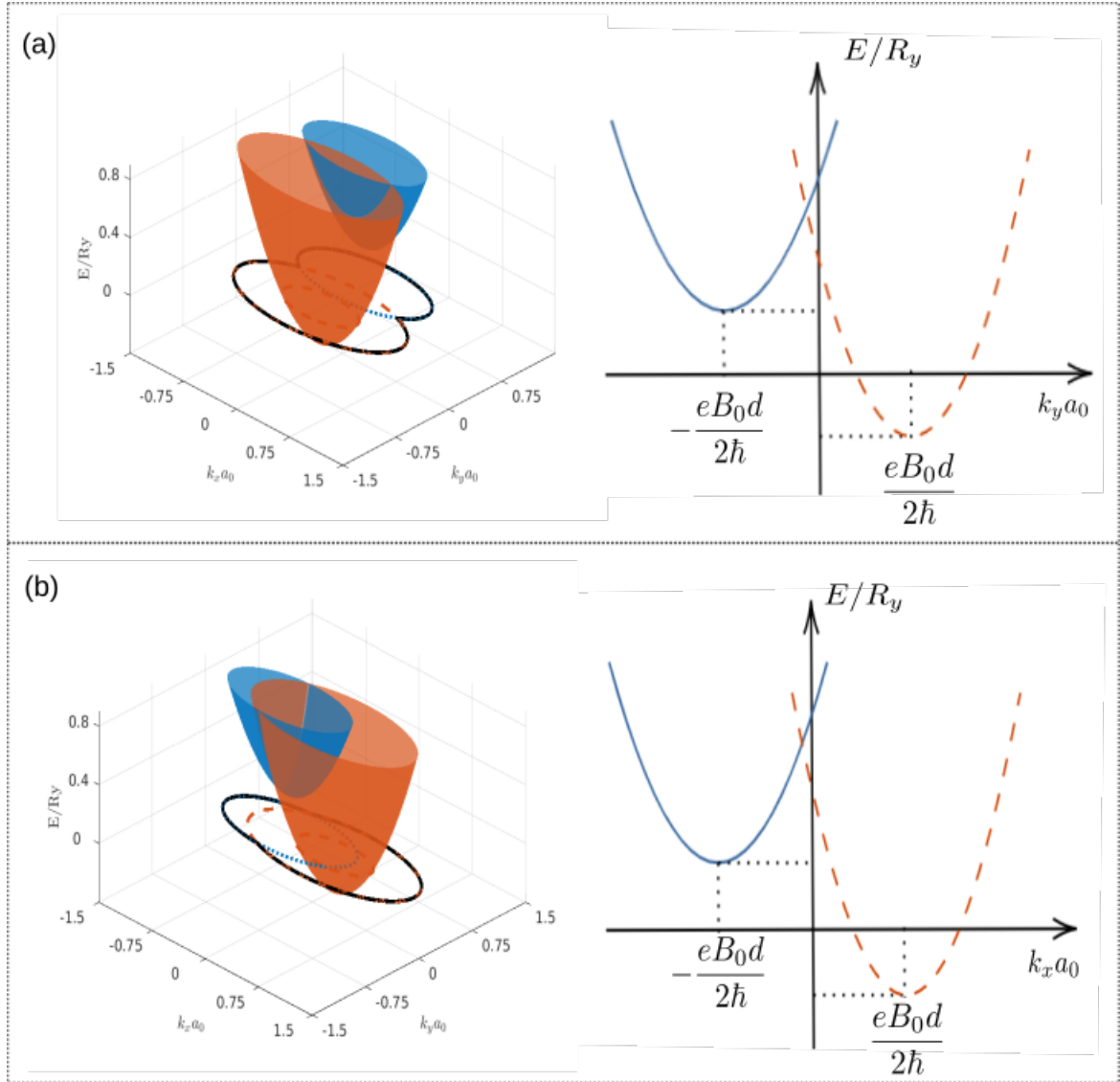


Figura 21 – Mesmas condições da Fig. 20, porém considerando agora  $\delta U \neq 0$ .

onde  $H_1|_{z=d/2}$  e  $H_2|_{z=-d/2}$  representam os Hamiltonianos das camadas de cima e de baixo, respectivamente, tendo as seguintes formas

$$H_1|_{z=d/2} = \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y'^2}{2m_y}, \quad (2.43a)$$

$$H_2|_{z=-d/2} = \frac{\hbar^2 k_x''^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y''^2}{2m_y}, \quad (2.43b)$$

sendo  $\Delta$  o fator de acoplamento. Observe nas Eqs. (2.43a) e (2.43b) que já estão inclusas a anisotropia do sistema ( $m_x \neq m_y$ ) e a rotação da bicamada ( $k'$  e  $k''$ ).

Notemos que a Eq. (2.42) está em termos de dois sistemas de coordenadas,  $k'$  e  $k''$ . Podemos usar as seguintes matrizes de rotação

$$\begin{pmatrix} k_x' \\ k_y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 & \sin \theta/2 \\ -\sin \theta/2 & \cos \theta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$



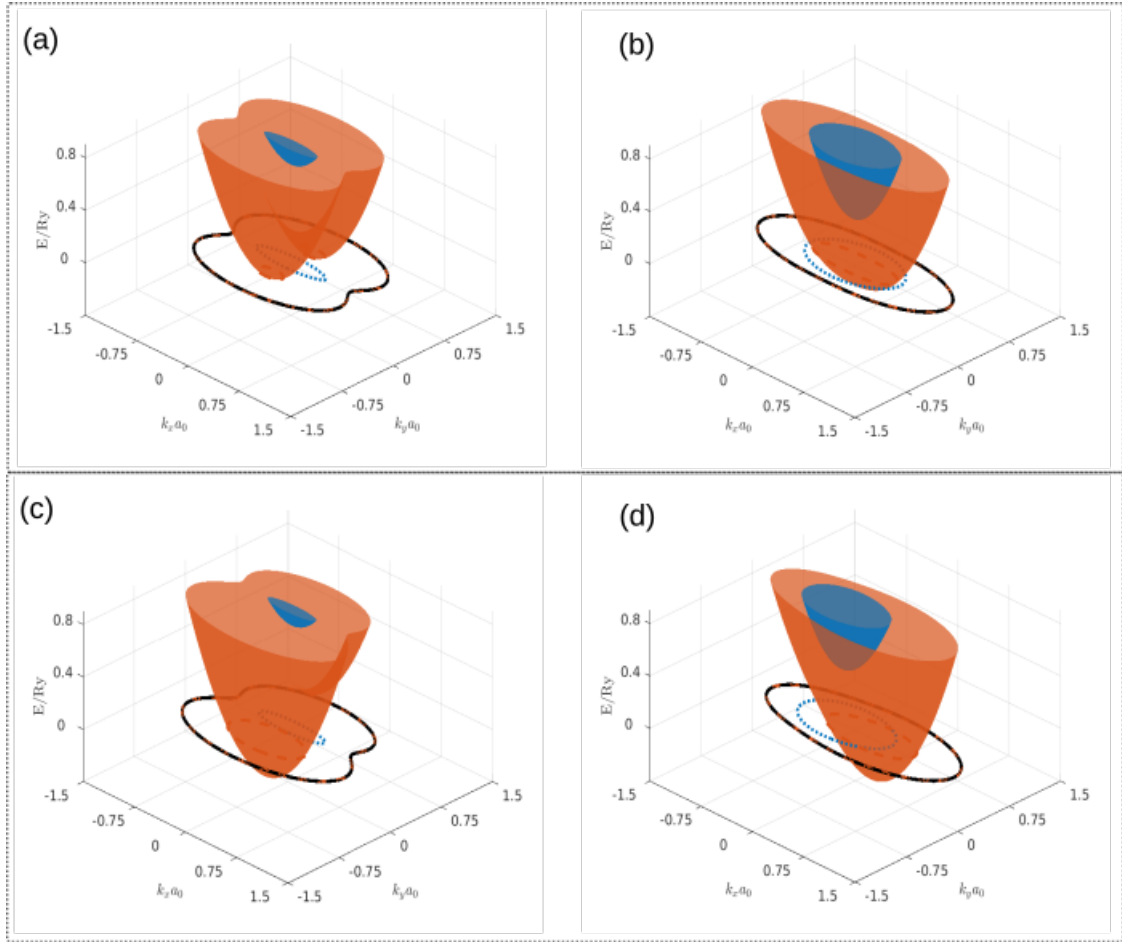


Figura 22 – Bicamada 2DEG anisotrópica acoplada na presença de campo magnético no plano. Em (a) e (b), consideramos  $\delta U = U_0 = 0$ , enquanto que em (c) e (d) fixamos  $U_0 = 0$  e  $\delta U \neq 0$ . O campo magnético em (a) e (c) está na direção  $\hat{x}$ , isto é, com  $\alpha_B = 0$ . Já em (b) e (d), o campo magnético está na direção  $\hat{y}$ , isto é, com  $\alpha_B = \pi/2$ .

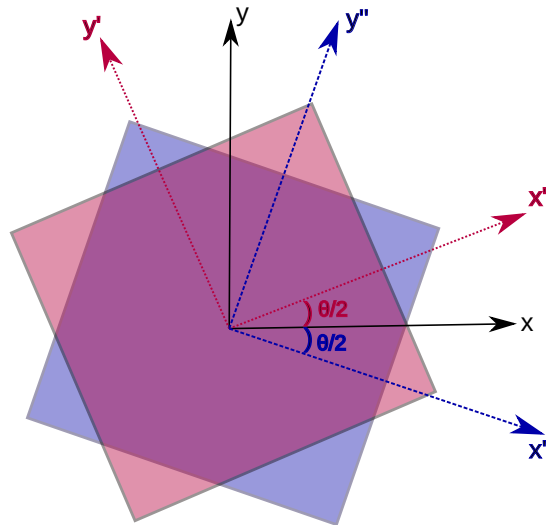


Figura 23 – Bicamada 2DEG anisotrópica acoplada rotacionada com um ângulo  $\theta$  em relação aos eixos cristalográficos.

$$\begin{pmatrix} k_x'' \\ k_y'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 & -\sin \theta/2 \\ \sin \theta/2 & \cos \theta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

para deixar o Hamiltoniano em termos de apenas um sistema de coordenada,  $k$ . Substituindo a Eq. (2.44) na Eq. (2.43a) temos o Hamiltoniano da camada de cima em termos de  $k_x$  e  $k_y$  como

$$H_1|_{z=d/2} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2\mu_y} + \frac{\hbar^2 k_x k_y}{\mu_{xy}}, \quad (2.46)$$

com

$$\frac{1}{\mu_x} = \frac{\cos^2 \theta/2}{m_x} + \frac{\sin^2 \theta/2}{m_y}, \quad (2.47a)$$

$$\frac{1}{\mu_y} = \frac{\sin^2 \theta/2}{m_x} + \frac{\cos^2 \theta/2}{m_y}, \quad (2.47b)$$

$$\frac{1}{\mu_{xy}} = \left( \frac{1}{m_x} - \frac{1}{m_y} \right) \cos \theta/2 \sin \theta/2. \quad (2.47c)$$

Fazendo o mesmo processo para o Hamiltoniano da camada de baixo, chegamos à

$$H_2|_{z=-d/2} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2\mu_y} - \frac{\hbar^2 k_x k_y}{\mu_{xy}}. \quad (2.48)$$

Com as Eqs. (2.46) e (2.48) definidas, temos que o Hamiltoniano do sistema [Eq. (2.42)] pode ser escrito em termos de um único sistema de coordenadas, alinhado com os eixos cristalográficos.

Vamos adicionar agora o efeito do campo magnético arbitrário no plano, definido na Eq. (2.18). Utilizando o potencial vetor da Eq. (2.21), e tomando  $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + e\vec{B}/2\hbar$ , podemos reescrever a Eq. (2.46) como

$$\begin{aligned} H_1|_{z=d/2} = & \frac{\hbar^2}{2\mu_x} \left( k_x + \frac{ezB_0}{\hbar} \sin \alpha_B \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2\mu_y} \left( k_y - \frac{ezB_0}{\hbar} \cos \alpha_B \right)^2 \\ & + \frac{\hbar^2}{\mu_{xy}} \left( k_x + \frac{ezB_0}{\hbar} \sin \alpha_B \right) \left( k_y - \frac{ezB_0}{\hbar} \cos \alpha_B \right). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Note que, nessa seção, o ângulo  $\theta$  representa a rotação dos planos e  $\alpha_B$  o ângulo que o campo magnético faz com o plano. Relatado isto, desenvolvemos as operações e organizamos os termos da Eq. (2.49), chegando ao seguinte Hamiltoniano para a camada de cima

$$\begin{aligned} H_1|_{z=d/2} = & \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2\mu_y} + \frac{\hbar^2 d^2}{8l_B^4} \left( \frac{\sin^2 \alpha_B}{\mu_2} + \frac{\cos^2 \alpha_B}{\mu_y} \right) + \frac{\hbar^2 d^2}{2\mu_{xy} l_B^2} (-\cos \alpha_B k_x + \sin \alpha_B k_y) \\ & + \frac{\hbar^2}{\mu_{xy}} \left( k_x k_y - \frac{d^2 \sin \alpha_B \cos \alpha_B}{l_B^2 4} \right) + \frac{\hbar^2 d}{2l_B^2} \left( \frac{\sin \alpha_B k_x}{\mu_x} - \frac{\cos \alpha_B}{\mu_y} \right). \end{aligned} \quad (2.50)$$

Seguindo os mesmos passos, podemos reescrever o Hamiltoniano para a camada de baixo como

$$H_2|_{z=-d/2} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2\mu_y} + \frac{\hbar^2 d^2}{8l_B^4} \left( \frac{\sin^2 \alpha_B}{\mu_2} + \frac{\cos^2 \alpha_B}{\mu_y} \right) + \frac{\hbar^2 d^2}{2\mu_{xy}l_B^2} (-\cos \alpha_B k_x + \sin \alpha_B k_y) - \frac{\hbar^2}{\mu_{xy}} \left( k_x k_y - \frac{d^2 \sin \alpha_B \cos \alpha_B}{l_B^2 4} \right) - \frac{\hbar^2 d}{2l_B^2} \left( \frac{\sin \alpha_B k_x}{\mu_x} - \frac{\cos \alpha_B}{\mu_y} \right). \quad (2.51)$$

Para termos uma expressão mais compacta do Hamiltoniano do sistema total, vamos definir

$$L(\vec{k}, B_0) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2\mu_y} + \frac{\hbar^2 d^2}{8l_B^4} \left( \frac{\sin^2 \alpha_B}{\mu_2} + \frac{\cos^2 \alpha_B}{\mu_y} \right) + \frac{\hbar^2 d^2}{2\mu_{xy}l_B^2} (-\cos \alpha_B k_x + \sin \alpha_B k_y), \quad (2.52)$$

e

$$N(\vec{k}, B_0) = \frac{\hbar^2}{\mu_{xy}} \left( k_x k_y - \frac{d^2 \sin \alpha_B \cos \alpha_B}{l_B^2 4} \right) + \frac{\hbar^2 d k_x}{2l_B^2} \left( \frac{\sin \alpha_B}{\mu_x} - \frac{\cos \alpha_B}{\mu_y} \right). \quad (2.53)$$

Nesse caso, a expressão para o Hamiltoniano do sistema total é dado por

$$H(\vec{k}) = \begin{pmatrix} z_+(\vec{k}, B_0) & \Delta \\ \Delta & z_-(\vec{k}, B_0) \end{pmatrix}, \quad (2.54)$$

onde

$$z_{\pm}(\vec{k}, B_0, U_0, \delta U) = L(\vec{k}, B_0, U_0, \delta U) \pm N(\vec{k}, B_0, U_0, \delta U). \quad (2.55)$$

Em adição a nossa análise, vamos agora adicionar o campo elétrico perpendicular a bicamada.

Lembremos que  $U_1 = U_0 + (\delta U)/2$  e  $U_2 = U_0 - (\delta U)/2$ , sendo  $U_1$  e  $U_2$  os potenciais elétricos na camada de cima e na de baixo, respectivamente. Dessa maneira, as funções  $L$  e  $N$  ficam:

$$L(\vec{k}, B_0, U_1) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2\mu_y} + \frac{\hbar^2 d^2}{8l_B^4} \left( \frac{\sin^2 \alpha_B}{\mu_2} + \frac{\cos^2 \alpha_B}{\mu_y} \right) + \frac{\hbar^2 d^2}{2\mu_{xy}l_B^2} (-\cos \alpha_B k_x + \sin \alpha_B k_y) + U_0 \quad (2.56)$$

e

$$N(\vec{k}, B_0, U_2) = \frac{\hbar^2}{\mu_{xy}} \left( k_x k_y - \frac{d^2 \sin \alpha_B \cos \alpha_B}{l_B^2 4} \right) + \frac{\hbar^2 d k_x}{2l_B^2} \left( \frac{\sin \alpha_B}{\mu_x} - \frac{\cos \alpha_B}{\mu_y} \right) + \frac{\delta U}{2}. \quad (2.57)$$

Diagonalizando a Eq. (2.55) com as funções  $L$  e  $N$  dadas pelas Eqs. 2.56 e 2.57, vamos obter os seguintes autovalores

$$E_{\pm}^{\Delta=0} = L(\hbar\mathbf{k}, B_0, U_0) \pm N(\hbar\mathbf{k}, B_0, \delta U), \quad (2.58a)$$

$$E_{\pm}^{\Delta \neq 0} = L(\hbar\mathbf{k}, B_0, U_0) \pm \sqrt{N^2(\hbar\mathbf{k}, B_0, \delta U) + \Delta^2}. \quad (2.58b)$$

Na Fig. 24 mostramos os gráficos das bandas de energia para um sistema desacoplado ( $\Delta = 0$ ) e vários valores de campo elétrico, de rotação das camadas e do campo magnético.

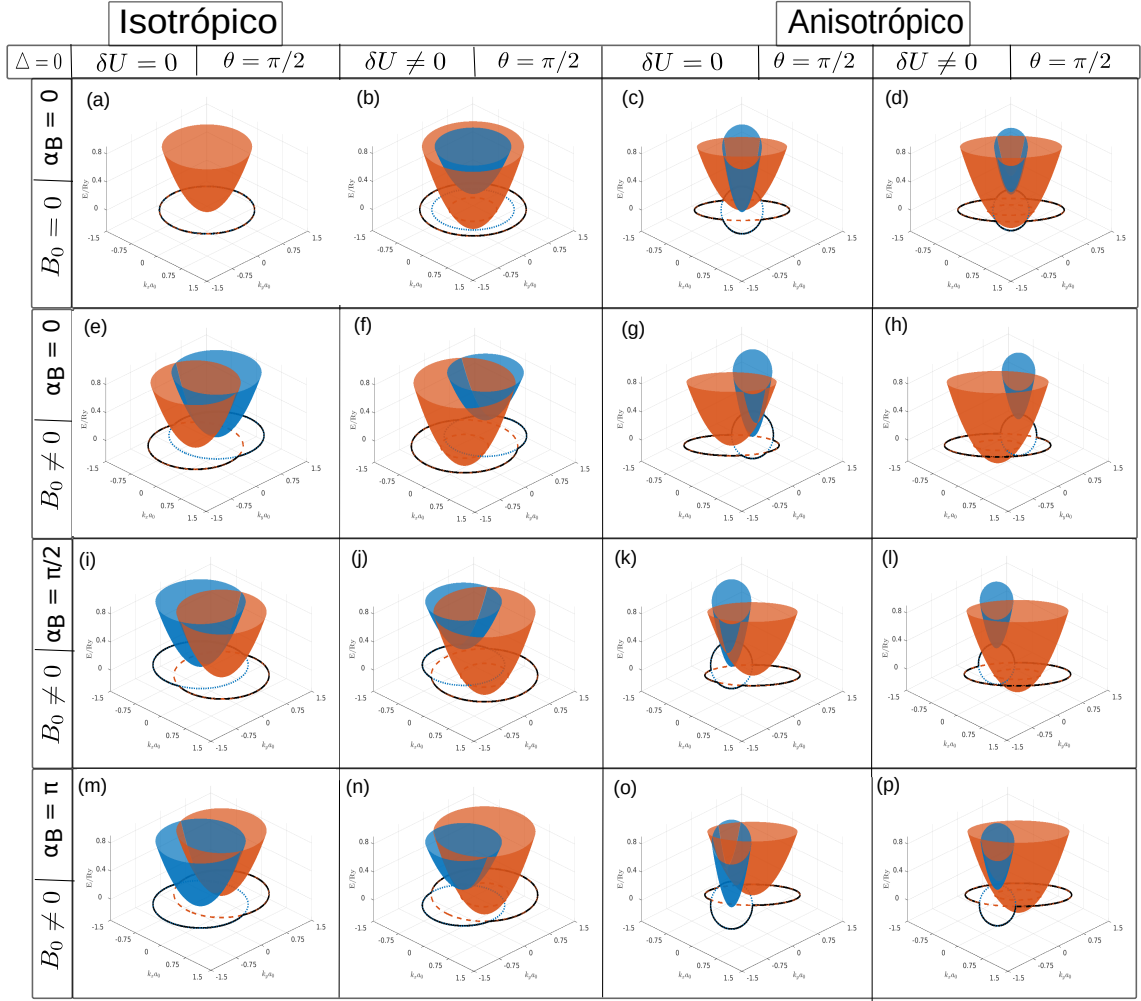


Figura 24 – Bicamada 2DEG isotrópica e anisotrópica rotacionada na presença de um campo elétrico perpendicular e a um campo magnético no plano. O ângulo  $\alpha_B$  representa a rotação do campo magnético no plano e o ângulo  $\theta$  representa a rotação das camadas em relação aos eixos cristalográficos. Consideramos aqui que as bicamadas estão desacopladas, isto é,  $\Delta = 0$ . Os símbolos  $R_y$  e  $a_0$  representam a energia de Rydberg e o raio de Bohr, respectivamente. A curva preta representa a isoenergia do sistema. Nos casos isotrópicos (anisotrópicos), tomamos as massas efetivas  $m_x/m_0 = m_y/m_0 = m/m_0 = 1.01$  ( $m_x/m_0 = 1.01$  e  $m_y/m_0 = 0.19$  (CUNHA; AL., 2020)).

Nas Figs. 24(a) e 24(c) mostramos as bandas de energia de  $E_{\pm}^{\Delta=0}$  para  $\delta U = B_0 = 0$  e  $\theta = \pi/2$ . No caso isotrópico,  $E_{\pm}^{\Delta=0}$  são dados por elipsóides torcidos  $E_{\pm}^{\Delta=0} = (h^2/2\mu_x)k_x^2 + (h^2/2\mu_y)k_y^2 \pm (h^2/\mu_{xy})k_x k_y$ , onde  $\mu_x$ ,  $\mu_y$  e  $\mu_{xy}$  são fatores de massa em relação a  $\theta$  como dado nas Eqs. (2.47a)-(2.47c). As curvas de isoenergias são duas elipses onde  $\theta$  é o ângulo entre seus semi-eixos maiores. Observe que não há quebra de degenerescência para o caso isotrópico.

Nas Figs. 24(g), 24(k), 24(o), 24(h), 24(l), e 24(p), mostramos os gráficos de  $E_{\pm}^{\Delta=0}$  por  $B_0 \neq 0$ ,  $\theta = \pi/2$  e vários valores de  $\delta U$  e  $\alpha_B$ . De acordo com a Eq. (2.58a), as energias da

banda podem ser reescritas como

$$E_{\pm}^{\Delta=0} = \frac{\hbar^2}{2\mu_x}(k_x - k_x^{\pm})^2 + \frac{\hbar^2}{2\mu_y}(k_y - k_y^{\pm})^2 \pm \frac{\hbar^2}{2\mu_{xy}}(k_x - k_x^{\pm})(k_y - k_y^{\pm}) \pm \delta U/2. \quad (2.59)$$

Portanto, as bandas  $E_{\pm}^{\Delta=0}$  são elipsóide torcidos com os vetores de onda deslocados por  $\mathbf{k}_{\pm}$ . O comportamento de  $E_{\pm}^{\Delta=0}$  para o caso isotrópico em relação a  $B_0$ ,  $\alpha_B$  e  $\delta U$  é o mesmo descrito para o caso anisotrópico, como é mostrado nas Figs. 24(e), 24(i), 24(m), 24(f), 24(j), e 24(n); porém, em vez de elipsóides, são descritos por parabolóides.

Na Fig. 25 mostramos as bandas de energia para um sistema desacoplado ( $\Delta \neq 0$ ) e vários valores de campo elétrico, de rotação das camadas e do campo magnético.

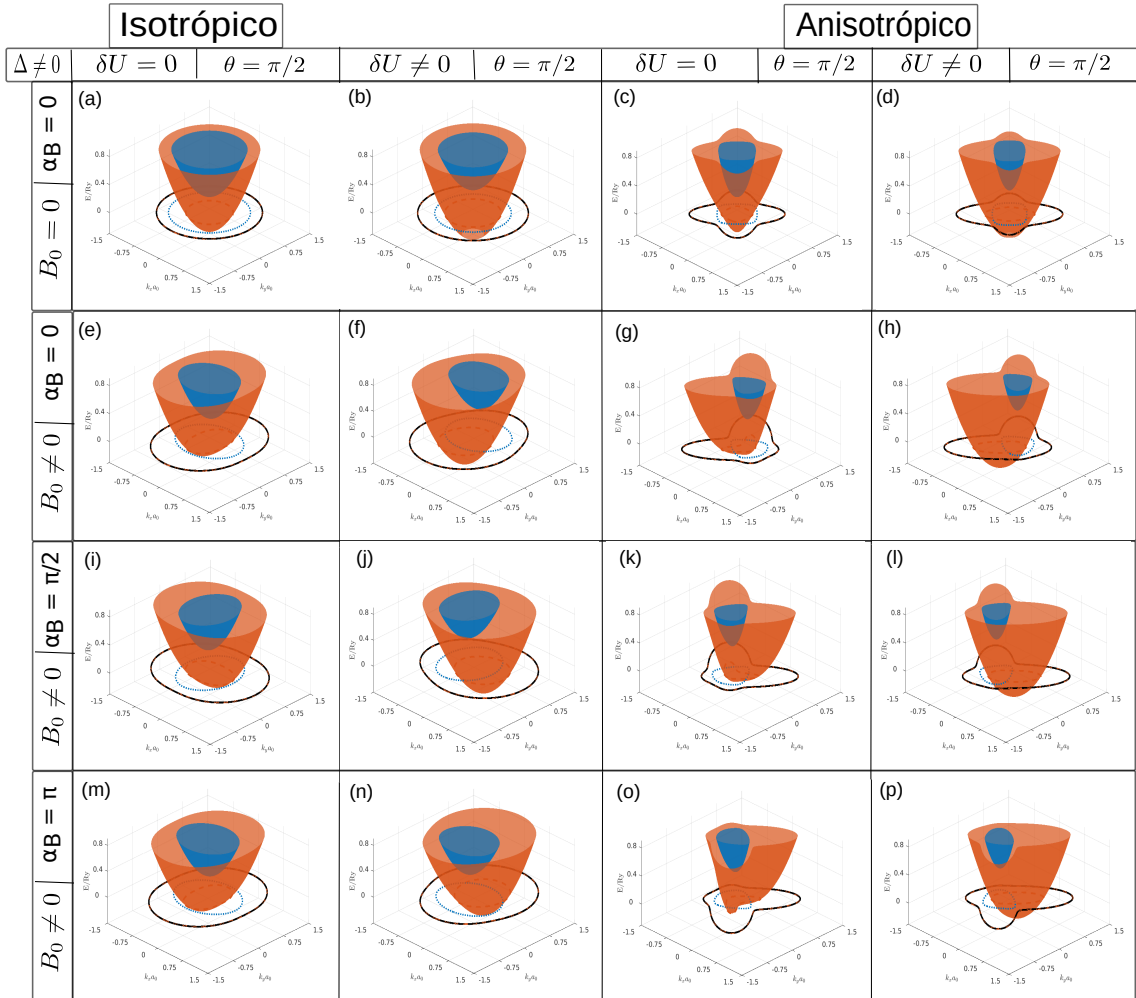


Figura 25 – Mesmas condições da Fig. 24, mas considerando agora o sistema acoplado, isto é, tomando  $\Delta \neq 0$ .

Nas Figs. 25(a) e 25(c), mostramos o gráfico de  $E_{\pm}^{\Delta \neq 0}$  para  $B_0 = \alpha_B = \delta U = 0$  e  $\theta = \pi/2$ . Um valor não nulo para  $\theta$  quebra a degenerescência para o caso isotrópico devido ao acoplamento entre as camadas, e para o caso anisotrópico além de quebrar a degenerescência,

este causa distorções nas bandas de energia. As curvas de isoenergia para o caso anisotrópico para  $E_{\pm}^{\Delta \neq 0}$  ( $E_{\pm}^{\Delta \neq 0}$ ) podem assumir uma forma simétrica de flor de quatro folhas (quase quadrada). Nas Figs. 25(g), 25(k), 25(o), mostramos os gráficos de  $E_{\pm}^{\Delta \neq 0}$  para  $\delta U = 0$ ,  $\theta = \pi/2$ ,  $B_0 \neq 0$  e vários valores de  $\alpha_B$ . Novamente, comparando-os com as Figs. 25(g), 25(k), 25(o), vemos a presença de *anti-crossings* e *gaps* de energia devido ao valor não-nulo  $\Delta \neq 0$ . Também observamos que combinando os efeitos de  $B_0$  e  $\theta$ , as curvas de isoenergia para  $E_{\pm}^{\Delta \neq 0}$  ( $E_{\pm}^{\Delta \neq 0}$ ) podem assumir uma forma simétrica de cara de coelho (palheta de violão). A orientação dessas formas no plano  $k_x k_y$  é controlada por  $\alpha_B$ . Para o caso isotrópico, como mostrado nas Figs. 25(e), 25(i), 25(m), 25(f), 25(j), e 25(n), podemos ver algumas distorções, mas comparado com o caso anisotrópico a distorção não é tão abrupta. Temos também a aparição dos *anti-crossings*.

É importante mencionar que os deslocamentos de origem no espaço  $\mathbf{k}$  devido ao campo magnético no plano não têm significado físico nas bandas de energia  $E_{\pm}^{\Delta=0}$ , pois podem ser anuladas por transformações de calibre apropriadas (HU; MACDONALD, 1992). No entanto,  $E_{\pm}^{\Delta=0}$  foi descrito para vários valores de  $B_0$  e  $\alpha_B$  para entender e enfatizar o papel do parâmetro de acoplamento intercamada  $\Delta$  nas bandas de energia  $E_{\pm}^{\Delta \neq 0}$  com  $B_0$ ,  $\alpha_B \neq 0$  e ver como esse parâmetro muda os padrões dos níveis de energia.

### 3 PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE FIOS QUÂNTICOS SEMICONDUTORES ANISOTRÓPICOS

Neste capítulo, iremos apresentar um estudo sobre as propriedades eletrônicas de fios quânticos em monocamadas de semicondutores anisotrópicos. De início, vamos analisar como será representado o sistema de um fio quântico rotacionado em uma monocamada. Logo após, iremos na Subseção 3.1.1 estudar o espectro de energia do sistema na ausência do campo magnético. Na Subseção 3.1.2, aplicamos um campo magnético perpendicular a monocamada. Por fim, estudaremos na Subseção 3.1.3 como se comporta o espectro de energia com o campo magnético aplicado no plano  $xy$ . Os resultados e discussões similares aos apresentados no presente capítulo foram reportados no artigo da Ref. (CUNHA; AL., 2020). A sua reprodução aqui é de suma importância para entendermos a física de fios quânticos em monocamadas de sistemas anisotrópicos, nos possibilitando um melhor aprofundamento para o próximo capítulo, quando trataremos do caso similar de fios quânticos definidos em um sistema de bicamada.

#### 3.1 Fios quânticos anisotrópicos

Nesta seção vamos considerar o seguinte sistema: um fio quântico de largura  $W$  formado por um potencial quadrado com barreiras infinitas ( $V_0 \rightarrow \infty$ ), alinhado ao longo de direções arbitrárias, como mostrado na Fig. 26.

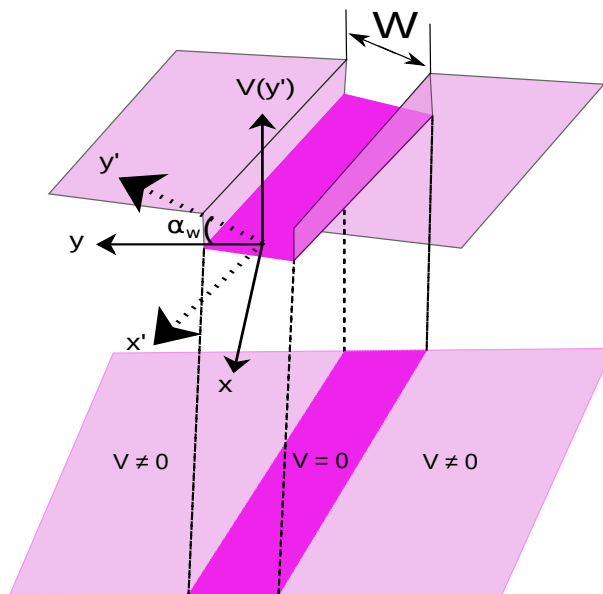


Figura 26 – Representação esquemática do fio quântico rotacionado definido eletrostaticamente por um potencial de poço quadrado infinito 1D da seguinte forma  $V(y') = V_0[(-y') + (y' - W)]$  com largura  $W$  e com  $V_0 > 0$ . A rotação do fio em relação aos eixos cristalográficos  $x$  e  $y$  é dada pela variação de  $\alpha$  que defini as novas coordenadas  $x'$  e  $y'$ .

O potencial do fio é representado, matematicamente, através da seguinte expressão  $V(y') = V_0[(-y') + (y' - W)]$  com  $V_0 > 0$ . Note que essa expressão é de uma seção transversal de um poço quadrado antissimétrico. Como o fio é rotacionado por um ângulo  $\alpha_W$ , o sistema é definido em um novo sistema de coordenadas  $x'$  e  $y'$  e não no sistema  $x$  e  $y$ .

### 3.1.1 Na ausência de campos magnéticos

Vimos no Cap. 2 que ao considerar a rotação das bicamadas novos termos aparecem no Hamiltoniano do sistema, de tal forma que o Hamiltoniano para uma das monocamadas é escrito da seguinte forma

$$H = \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x} + \frac{\hbar^2 k_y'^2}{2\mu_y} + \frac{\hbar^2 k_x' k_y'}{\mu_{xy}}, \quad (3.1)$$

onde  $\mu_x$ ,  $\mu_y$  e  $\mu_{xy}$  são dados nas Eqs. (2.47a), (2.47b) e (2.47c), respectivamente; porém, em vez de serem expressas em termos de  $\theta$ , que é a rotação da camada, serão expressas em termos de  $\alpha_W$ , que é a rotação do fio quântico. Usando a transformação  $\vec{k}' \rightarrow -i\nabla'$ , a Eq. (3.1) pode ser escrita como

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_x} \nabla_x'^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_y} \nabla_y'^2 - \frac{\hbar^2}{\mu_{xy}} \nabla_x' \nabla_y'. \quad (3.2)$$

Sem perda de generalidade, supomos que as interfaces do fio são paralelas à direção  $x'$ , que corresponde a direção que temos simetria de translação, nos permitindo escrever a função de onda tal com

$$\Psi(x', y') = \phi(y') e^{ik_x' x'}. \quad (3.3)$$

Agora, aplicando a Eq. (3.2) na Eq. (3.3) e organizando os termos, chegaremos na seguinte equação diferencial

$$-\frac{\hbar}{2\mu_y} \frac{\partial^2}{\partial y'^2} \phi(y') + -\frac{i\hbar^2 k_x'}{\mu_{xy}} \frac{\partial}{\partial y'} \phi(y') + \left( \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x} - E \right) \phi(y') = 0. \quad (3.4)$$

Supomos uma função do tipo  $\phi = e^{i\gamma y'}$ , sendo  $\gamma$  o parâmetro a ser determinado. Utilizando esta função na Eq. (3.4), chegamos que

$$\gamma = \pm \sqrt{\frac{2\mu_x E}{\hbar^2} - \left( \frac{\mu_y}{\mu_x} - \frac{\mu_y^2}{\mu_{xy}^2} \right) k_x'^2 - \frac{\mu_y}{\mu_{xy}} k_x'}. \quad (3.5)$$

Com isso, a solução para a Eq. (3.4) é do tipo

$$\phi(y') = A e^{ik_y'^+ y'} + B e^{ik_y'^- y'}, \quad (3.6)$$



onde definimos  $k_y'^{\pm} = \pm\gamma_1 - \gamma_2$  com

$$\gamma_1 = \sqrt{\frac{2\mu_x E}{\hbar^2} - \left(\frac{\mu_y}{\mu_x} - \frac{\mu_y^2}{\mu_{xy}^2}\right) k_x'^2}, \quad (3.7)$$

e

$$\gamma_2 = \frac{\mu_y}{\mu_{xy}} k_x'. \quad (3.8)$$

Podemos reescrever agora a Eq. (3.3) da seguinte forma

$$\Psi(x', y') = [Ae^{ik_y'^+ y'} + Be^{ik_y'^- y'}] e^{ik_{x'} \cdot x'}. \quad (3.9)$$

Reorganizando os termos da Eq. (3.9), temos que

$$\Psi(x', y') = [Ae^{i\gamma_1 y'} + Be^{-i\gamma_1 y'}] \exp \left[ i \left( x' - \frac{\mu_y}{\mu_{xy}} \right) k_x' \right]. \quad (3.10)$$

Agora podemos considerar as condições de contorno do fio quântico. Quando  $y' = 0 \rightarrow \Psi = 0$ , encontraremos que  $B = -A$ , e quando fazemos  $y' = W \rightarrow \Psi = 0$ , chegamos que  $\gamma_1 = n\pi/W$ .

Com essas considerações, a Eq. (3.10) se reduz a

$$\Psi(x', y') = A \sin \left( \frac{n\pi}{W} y' \right) \exp \left[ i \left( x' - \frac{\mu_y}{\mu_{xy}} \right) k_x' \right]. \quad (3.11)$$

Essa é a função de onda para um fio quântico rotacionado. Podemos encontrar a energia do sistema substituindo  $\gamma_1 = n\pi/W$  na Eq. (3.7) obtendo a seguinte expressão

$$E = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2\mu_y W^2} + \frac{\rho \hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x}, \quad (3.12)$$

onde  $\rho = 1 - \frac{\mu_x \mu_y}{\mu_{xy}^2}$ . Observe que tanto a Eq. (3.11) como a Eq. (3.12), ao considerarmos a espessura fixa, isto é,  $W$  constante, estas equações dependem somente da orientação  $\theta$  do fio quântico em relação ao eixo de anisotropia. Observe que, se fizermos  $k_x' = 0$  na Eq. (3.12), a energia cai quadraticamente com o aumento da espessura do fio. Podemos ver melhor o comportamento na Fig. 27 quando analisamos os três primeiros níveis de energia para um fio quântico de fosforeno.

Como se pode observar na Fig. 27, o aumento do ângulo de rotação do fio ocasiona uma diminuição no espaçamento entre os níveis de energia, tornando-os mais próximos, nos permitindo uma taxa de transição maior entre eles e um número maior de estados acessíveis para o elétron. Podemos analisar também como se comporta os espectros de energia em relação ao espaço dos momentos quando fazemos a espessura do fio constante, como mostrado na Fig. 28.

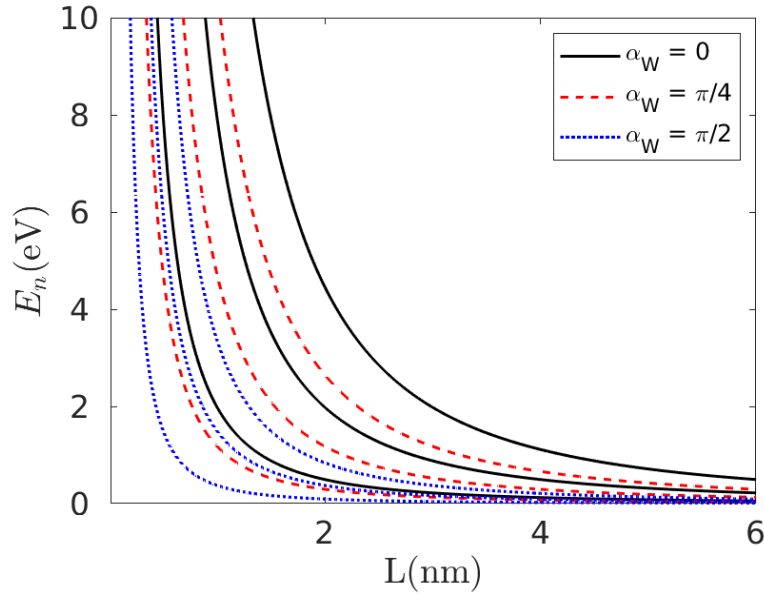


Figura 27 – Três primeiros níveis de energia para o fio quântico de fosforeno em função da sua espessura para diferentes ângulos  $\alpha_W$  de alinhamento com os eixos de anisotropia. Foi considerado  $k'_x = 0$ .

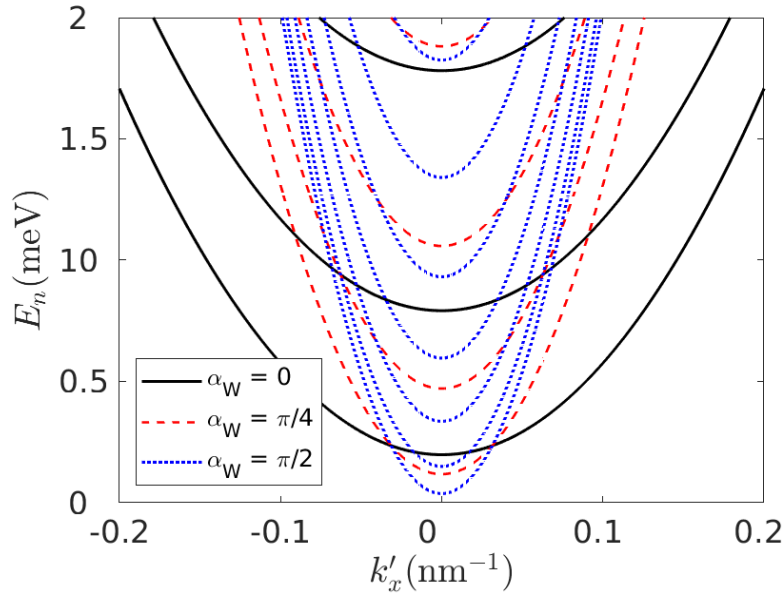


Figura 28 – Relação de dispersão de um fio quântico de fosforeno, considerando  $W = 1$  nm e diferentes ângulos  $\alpha_W$  de rotação.

Os níveis de energia têm o formato de parábolas que são cada vez mais achatadas quando aumentamos o valor de  $\alpha_W$ . Essa diferença na concavidade se dá pelo fato do fio quântico sair de uma direção que tem maior massa ( $m_x/m_0 = 1.01$ ) para uma direção que tem uma massa menor ( $m_x/m_0 = 0.19$ ). Podemos ver também a diminuição do espaçamento dos níveis e o aumento de estados acessíveis.

Na Fig. 29, temos a energia em função do ângulo de rotação  $\alpha_W$ , quando fazemos

$W = 1$  nm e  $k'_x = 0$ . Na Fig. 29 mostramos como os níveis de energia que eram bem dispersos para  $\alpha_W = 0$  tendem a ficar menos espaçados variando o ângulo até  $\alpha_W = \pi/2$ .

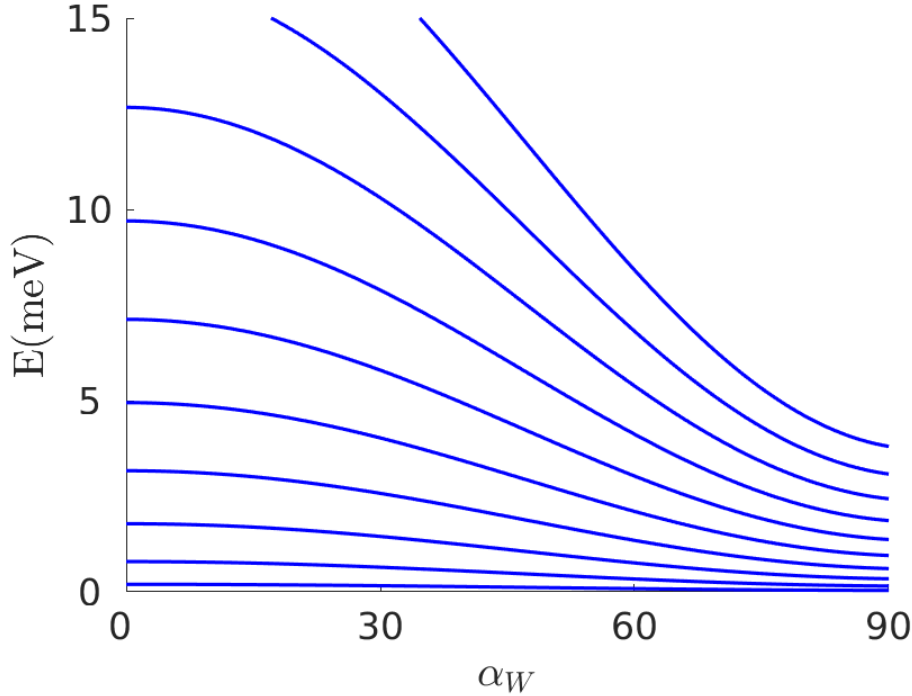


Figura 29 – Níveis de energia de um fio quântico de fosforeno com  $W = 1$  nm e  $k'_y = 0$  em função do ângulo de rotação  $\alpha_W$ .

### 3.1.2 Na presença de um campo magnético perpendicular

Agora vamos incluir no sistema um campo magnético perpendicular ao fio. Temos agora que analisar o potencial vetor para podermos fazer a transformada  $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$ . Como o fio está no plano  $xy$ , o campo magnético estará na coordenada  $z$ . Assumiremos o seguinte potencial vetor

$$\vec{A} = \left( -By', B\frac{\mu_2}{\mu_3}y', 0 \right), \quad (3.13)$$

de tal forma que, quando fizermos  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$  o campo seja dado na direção  $\hat{z}$ . Agora, aplicando a transformada com o potencial vetor da Eq. (3.13) na Eq. (3.1) vamos chegar na seguinte expressão

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_y} \frac{d^2\Psi}{dy'^2} - i\frac{\hbar^2 k'_x}{\mu_{xy}} \frac{d\Psi}{dy'} + \frac{\rho}{2\mu_x} (eBy' + \hbar k'_x)^2 + (1 - \rho) \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x} = E\Psi. \quad (3.14)$$

Podemos simplificar a Eq. (3.14) fazendo a seguinte transformação de coordenada

$$\tilde{y} = y' + \frac{\hbar k'_x}{eB}, \quad (3.15)$$

definindo a frequência de ciclotron para um sistema anisotrópico rotacionado tal como

$$w_c^2 = \rho \left( \frac{eB}{\mu_x} \right)^2 \quad (3.16)$$

e por fim, definindo a energia como

$$E' = E - (1 - \rho) \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\mu_x}. \quad (3.17)$$

Com isso, podemos reescrever a Eq. (3.14) como

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_y} \frac{d^2 \Psi}{d\tilde{y}^2} - i \frac{\hbar^2 k_x'}{\mu_{xy}} \frac{d\Psi}{d\tilde{y}} + \frac{\mu_x w_c^2 \tilde{y}^2}{2} \Psi = E' \Psi. \quad (3.18)$$

Podemos supor um *ansatz* que simplifique mais a Eq. (3.18). Tomando

$$\Psi(x', \tilde{y}) = \exp \left( -ik_y' \frac{\mu_y}{\mu_{xy}} \tilde{y} \right) \phi(x', \tilde{y}) \quad (3.19)$$

e aplicando na Eq. (3.18), obtem-se

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_y} \frac{d^2 \phi}{d\tilde{y}^2} + \frac{m^* w_c^2 \tilde{y}^2}{2} \phi = \sqrt{\frac{\mu_y}{\mu_{xy}}} E \phi, \quad (3.20)$$

sendo  $m^* = \sqrt{\mu_x \mu_y}$ . Observe que temos uma equação diferencial de um oscilador harmônico. Podemos utilizar do cálculo numérico para resolver a Eq. (3.20); para isso vamos fazer o uso da discretização por diferenças finitas que consiste em aproximar derivadas de funções contínuas por diferenças entre valores discretos da função, permitindo que problemas contínuos sejam resolvidos em malhas ou grades de pontos (FILHO, 2022). Primeiro, vamos discretizar a derivada da Eq. (3.20) fazendo a primeira derivada pela direita e a segunda pela esquerda, para se minimizar o erro associado. Portanto

$$\frac{d\phi}{d\tilde{y}} \approx \frac{\phi(\tilde{y} + \Delta\tilde{y}) - \phi(\tilde{y})}{\Delta\tilde{y}}, \quad (3.21a)$$

$$\frac{d\phi}{d\tilde{y}} \approx \frac{\phi(\tilde{y}) - \phi(\tilde{y} - \Delta\tilde{y})}{\Delta\tilde{y}}. \quad (3.21b)$$

Para encontrarmos a derivada segunda podemos expandir qualquer uma das equações acima em série de Taylor que teremos o seguinte resultado

$$\frac{d^2 \phi}{d\tilde{y}^2} \approx \frac{\phi(\tilde{y} + \Delta\tilde{y}) - 2\phi(\tilde{y}) + \phi(\tilde{y} - \Delta\tilde{y})}{\Delta\tilde{y}^2}. \quad (3.22)$$

Substituindo a Eq. (3.22) na Eq. (3.21a) e escrevendo  $V(\tilde{y}) = m^* w_c^2 \tilde{y}^2 / 2$ , temos que

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_y \Delta\tilde{y}^2} [\phi(\tilde{y} + \Delta\tilde{y}) - 2\phi(\tilde{y}) + \phi(\tilde{y} - \Delta\tilde{y})] + V(\tilde{y}) \phi = \sqrt{\frac{\mu_y}{\mu_{xy}}} E \phi. \quad (3.23)$$

Organizando os termos e trocando esta notação por uma notação de índice

$$\delta\phi_{i-1} + (V_i - 2\delta)\phi_i + \delta\phi_{i+1} = \varepsilon E\phi_i. \quad (3.24)$$

onde  $\delta = -\hbar^2/2\mu_y\Delta\tilde{y}^2$  e  $\varepsilon = \sqrt{\mu_y/\mu_{xy}}$ . A Eq. (3.24) forma um sistema de equações lineares ao se tomar os diferentes valores dos índices  $i$ , como se pode ser abaixo

$$\begin{aligned} 0 &+ (V_1 - 2\delta)\phi_1 + \delta\phi_2 = \varepsilon E\phi_1, \\ \delta\phi_1 &+ (V_2 - 2\delta)\phi_2 + \delta\phi_3 = \varepsilon E\phi_2, \\ \delta\phi_2 &+ (V_3 - 2\delta)\phi_3 + \delta\phi_4 = \varepsilon E\phi_3, \\ \vdots &+ \vdots + \vdots = \vdots \\ \delta\phi_{N-2} &+ (V_{N-1} - 2\delta)\phi_{N-1} + \delta\phi_N = \varepsilon E\phi_{N-1}, \\ \delta\phi_{N-1} &+ (V_N - 2\delta)\phi_N + 0 = \varepsilon E\phi_N. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Escrevendo  $\beta_i = V_i - 2\delta$ , a Eq. (3.25) pode ser reescrita como uma matriz na seguinte forma

$$\begin{bmatrix} \beta_1 & \delta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \delta & \beta_2 & \delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \delta & \beta_3 & \delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \delta & \beta_{N-1} & \delta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \delta & \beta_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{N-1} \\ \phi_N \end{bmatrix} = \varepsilon E \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{N-1} \\ \phi_N \end{bmatrix}. \quad (3.26)$$

Agora temos um problema equivalente a de autovetores e autovalores,  $H\phi = E\phi$ , onde a matriz quadrada de ordem  $N$  representa no lado esquerdo da Eq. (3.26) o operador Hamiltoniano discreto.

Para início de análise, vamos entender como a mudança do ângulo e do campo magnético interferem nos estados eletrônicos confinados. Na Fig. 30 temos a representação da densidade de probabilidade do estado fundamental quando variamos o ângulo de rotação na presença e na ausência do campo magnético.

Observe que quando consideramos  $\alpha_W = 0$  a densidade de probabilidade é mais localizada na presença do campo magnético (linha preta) do que na sua ausência (linha verde). Quando consideramos  $B = 5$  T e variamos o  $\alpha_W$  percebemos que quanto maior a rotação mais a  $|\psi|^2$  se torna localizada. Note que para  $B = 0$ , mesmo rotacionando o fio, não temos nenhuma interferência na densidade de probabilidade (linha verde).

Podemos analisar agora a relação de dispersão para diferentes ângulos de alinhamento como mostrado na Fig. 31. Para  $\alpha_W = 0$  temos as curvas sólidas pretas, para  $\alpha_W = \pi/4$  temos

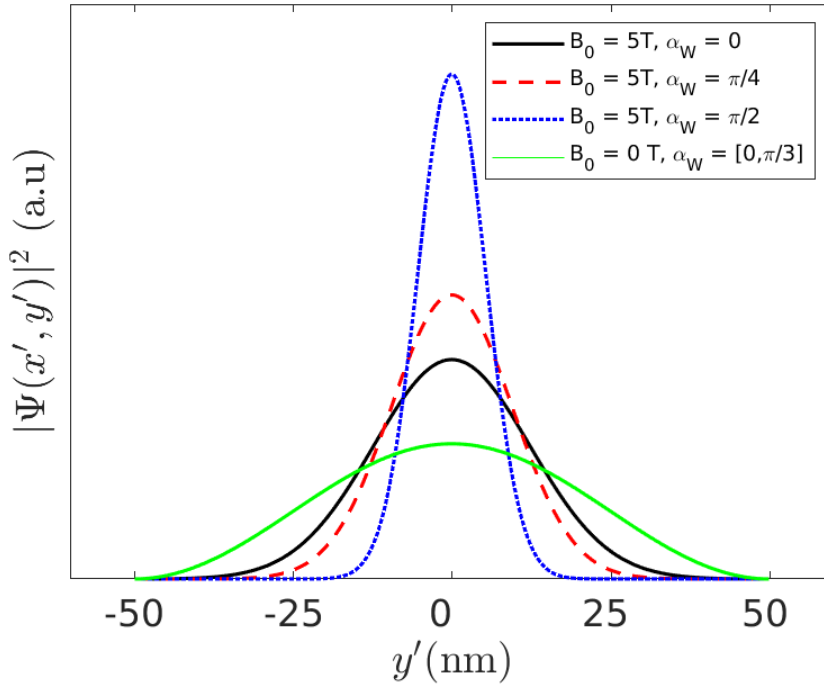


Figura 30 – Módulo ao quadrado da função de onda para fios quânticos rotacionados anisotrópicos na presença de um campo magnético externo perpendicular,  $B = 5$  T, com uma largura do fio fixa  $L = 100$  nm e vetor de onda  $k_x = 0$ . As curvas com ponto preto tracejado, vermelho tracejado e azul pontilhado correspondem ao caso dos ângulos de rotação  $\alpha_W = 0$ ,  $\alpha_W = \pi/4$  e  $\alpha_W = \pi/2$ , respectivamente. Para comparação,  $|\Psi|^2$  para  $B = 0$  é mostrado pela curva sólida verde.

as curvas tracejadas vermelhas e as curvas tracejadas azuis são para  $\alpha_W = \pi/2$ . Consideramos a largura do fio quântico fixa  $W = 100$  nm e o campo magnético externo perpendicular  $B = 5$  T.

Pela Fig. 31 podemos notar que, em torno de  $k_x = 0$  temos que os níveis de energia são planos, onde  $dE/dk_x = 0$ . Para baixas energias isto fica mais evidente pois os estados estão mais fortemente confinados devido ao campo magnético, porém, quando aumentamos a energia os estados começam a ficar mais dispersos, nos levando aos estados Hall quânticos. Este caso é semelhante as de estruturas semicondutoras isotrópicas com dois limites. Outro fator que podemos abordar na Fig. 31 é a presença das bordas, pois elas dão origem a estados de propagação que resultam nos estados de borda Hall quântico que estão relacionados com a região dispersiva do espectro de energia. Então, da Fig. 31 temos que os estados de borda Hall quântico são afetados diretamente pelo alinhamento do fio quântico e a medida que variamos  $\alpha_W$ , os estados de energia se torna menos dispersos.

Outra análise que podemos fazer é a da dependência do campo magnético dos estados confinados em fios quânticos anisotrópicos. Na Fig. 32 temos os espectros para vetores de onda nulos e não nulos que estão representados nos painéis (a) e (b), respectivamente, para três

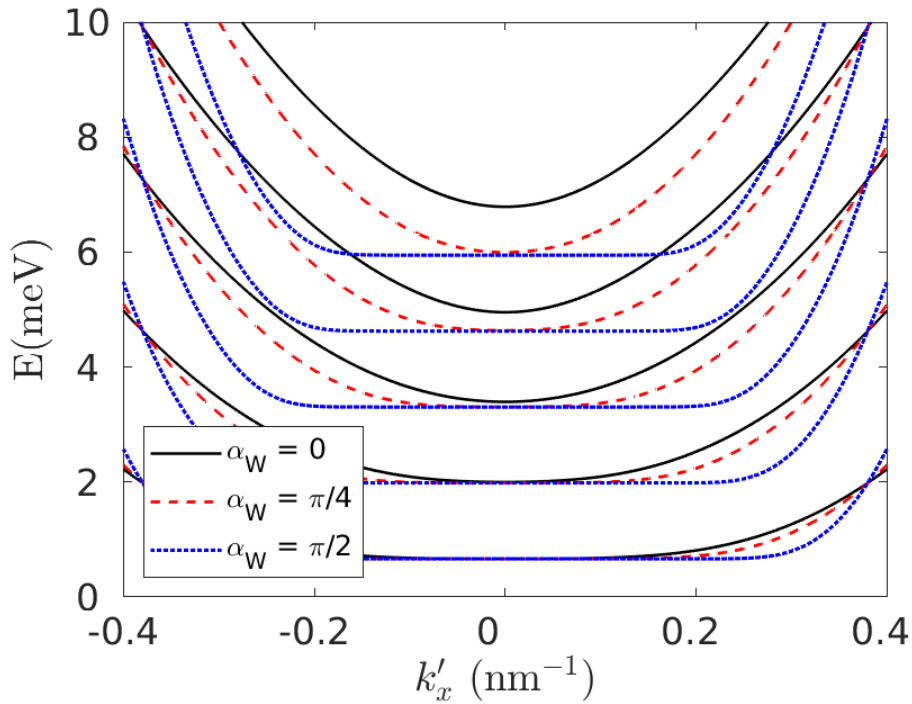


Figura 31 – Relação de dispersão de fosforeno QW para diferentes ângulos de alinhamento  $\alpha$  em relação aos eixos de anisotropia e largura QW fixa  $W = 100$  nm e amplitude do campo magnético  $B = 5$  T. Curvas sólidas pretas, tracejadas vermelhas e tracejadas azuis curtas correspondem às espectro para ângulos de rotação  $\alpha_W = 0$ ,  $\alpha_W = \pi/4$  e  $\alpha_W = \pi/2$ , respectivamente.

diferentes ângulos de rotação  $\alpha_W = 0$ ,  $\alpha_W = \pi/4$  e  $\alpha_W = \pi/2$ . Temos que o comprimento magnético é inversamente proporcional ao campo magnético, logo, quando a intensidade do campo magnético aumenta, o comprimento magnético diminui e, pela Fig. 32 temos que ele se torna menor que o tamanho do sistema, de tal forma que os efeitos de confinamento são fortemente reduzidos e os níveis magnéticos do fio quântico de fosforeno se convergem para os níveis de Landau de uma folha infinita de fosforeno. É visível que com o aumento da magnitude do campo magnético o espaçamento entre os níveis de energia é afetado de tal forma que independentemente da amplitude do vetor de onda, como também da rotação do fio quântico, os níveis de energia irão convergir para os níveis de Landau de um sistema infinito.

### 3.1.3 Na presença de campo magnético no plano

Para fazermos a análise do fio quântico rotacionado com o campo magnético no plano vamos utilizar o primeiro elemento da matriz da Eq. (2.54) que é representado pela soma de  $M(\vec{k}, B_0) + N(\vec{k}, B_0)$ , com termos dados nas Eqs. (2.56) e (2.57), respectivamente. Observe que essa equação representa uma monocamada rotacionada anisotrópica na presença de campos externos: campo magnético no plano e campo elétrico perpendicular à monocamada. Para

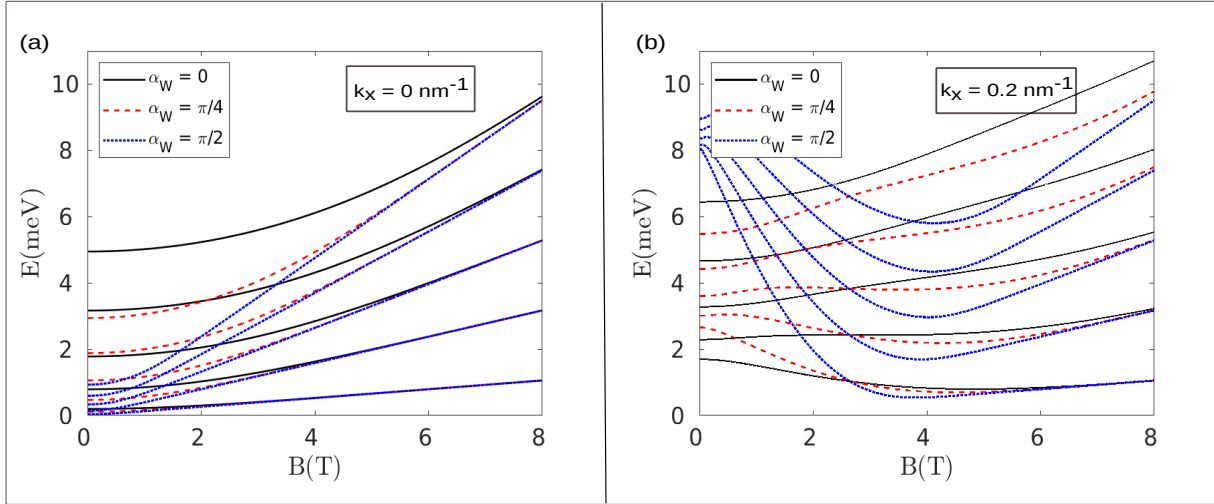


Figura 32 – Níveis de energia de um fio quântico de fosforeno com largura  $L = 100$  nm em função do campo magnético para valores de vetor de onda (a)  $k_x = 0$  e (b)  $k_x = 0,2 \text{ nm}^{-1}$  para diferentes ângulos de rotação  $\alpha$  em relação ao eixos de anisotropia.

facilitar os cálculos, vamos escrever a equação no sistema de coordenadas alinhado ao fio quântico. Primeiro, vamos considerar a seguinte matriz de rotação

$$\begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\alpha_W) & -\sin(\alpha_W) \\ \sin(\alpha_W) & \cos(\alpha_W) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Agora, podemos representar  $M(\vec{k}, B_0)$  no novo sistema de coordenadas, tal como

$$\begin{aligned} L(\vec{k}', B_0) &= \frac{\hbar^2 k'^2_x}{2\Gamma_x} + \frac{\hbar^2 k'^2_y}{2\Gamma_y} + \frac{k'_x k'_y}{\Gamma_{xy}} + \frac{\hbar^2 d}{2\mu_{xy} l_B^2} [-k'_x \cos(\alpha_B + \alpha_W) + k'_y \sin(\alpha_B + \alpha_W)] \\ &+ \frac{\hbar^2 d^2}{8l_b^4} \left[ \frac{\sin^2(\alpha_B)}{\mu_x} + \frac{\cos^2(\alpha_B)}{\mu_y} \right], \end{aligned} \quad (3.28)$$

assim como  $N(\vec{k}, B_0)$

$$\begin{aligned} N(\vec{k}', B_0) &= \frac{\hbar^2}{\mu_{xy}} [k'^2_x \cos(\alpha_W) \sin(\alpha_W) - k'^2_y \cos(\alpha_W) \sin(\alpha_W) + k'_x k'_y [\cos^2(\alpha_W) - \sin^2(\alpha_W)]] \\ &- \frac{\hbar^2}{\mu_{xy}} \left( \frac{d^2 \sin(\alpha_B) \cos(\alpha_B)}{4l_B^2} \right) + \frac{\hbar^2 d}{2l_B^2} \left[ \frac{k'_x \cos(\alpha_W) \sin(\alpha_B)}{\mu_x} - \frac{k'_x \cos(\alpha_B) \sin(\alpha_W)}{\mu_y} \right] \\ &- \frac{\hbar^2 d}{2l_B^2} \left[ \frac{k'_y \sin(\alpha_W) \sin(\alpha_B)}{\mu_x} - \frac{k'_y \cos(\alpha_B) \cos(\alpha_W)}{\mu_y} \right]. \end{aligned} \quad (3.29)$$

onde,

$$\Gamma_x = \frac{\cos^2(\alpha_W)}{\mu_x} + \frac{\sin^2(\alpha_W)}{\mu_y}, \quad (3.30a)$$

$$\Gamma_y = \frac{\sin^2(\alpha_W)}{\mu_x} + \frac{\cos^2(\alpha_W)}{\mu_y}, \quad (3.30b)$$

$$\Gamma_{xy} = \left( \frac{1}{\mu_y} - \frac{1}{\mu_x} \right) \sin(\alpha_W) \cos(\alpha_W). \quad (3.30c)$$



Porém, não há necessidade da rotação dos eixos anisotrópicos em relação aos eixos  $x$ - $y$ . Devido a isto, podemos tomar  $\theta = 0$  nos termos  $M(\vec{k}', B_0)$  e  $N(\vec{k}', B_0)$ , resultando em

$$L(\vec{k}', B_0) = \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\Gamma_x(\theta = 0)} + \frac{\hbar^2 k_y'^2}{2\Gamma_y(\theta = 0)} + \frac{k_x' k_y'}{\Gamma_{xy}(\theta = 0)} + \frac{\hbar^2 d^2}{8l_b^4} \left[ \frac{\sin^2(\alpha_B)}{m_x} + \frac{\cos^2(\alpha_B)}{m_y} \right], \quad (3.31a)$$

$$N(\vec{k}', B_0) = \frac{\hbar^2 d}{2l_B^2} \left[ \frac{k_x' \cos(\alpha_W) \sin(\alpha_B)}{m_x} - \frac{k_x' \cos(\alpha_B) \sin(\alpha_W)}{m_y} \right] - \frac{\hbar^2 d}{2l_B^2} \left[ \frac{k_y' \sin(\alpha_W) \sin(\alpha_B)}{m_x} - \frac{k_y' \cos(\alpha_B) \cos(\alpha_W)}{m_y} \right]. \quad (3.31b)$$

Fazendo a substituição  $\vec{k} \rightarrow -i\nabla$ , a Eq. (3.31a) se reduz a

$$L(\vec{k}', B_0) = L_2 \frac{d^2}{dy'^2} + L_1 \frac{d}{dy'} + M_0, \quad (3.32)$$

onde

$$L_2 = -\frac{\hbar^2}{2\Gamma_y(\theta = 0)}, \quad (3.33a)$$

$$L_1 = -\frac{i\hbar^2}{\Gamma_{xy}(\theta=0)} k_x', \quad (3.33b)$$

$$L_0 = \frac{\hbar^2 k_x'^2}{2\Gamma_x(\theta = 0)} + \frac{\hbar^2 d^2}{8l_b^4} \left[ \frac{\sin^2(\alpha_B)}{m_x} + \frac{\cos^2(\alpha_B)}{m_y} \right]. \quad (3.33c)$$

A Eq. (3.31b) torna-se

$$N(\vec{k}', B_0) = N_2 \frac{d^2}{dy'^2} + N_1 \frac{d}{dy'} + N_0, \quad (3.34)$$

onde

$$N_2 = 0, \quad (3.35a)$$

$$N_1 = \frac{\hbar^2 d}{2l_B^2} \left[ \frac{\sin(\alpha_W) \sin(\alpha_B)}{m_x} - \frac{\cos(\alpha_B) \cos(\alpha_W)}{m_y} \right], \quad (3.35b)$$

$$N_0 = -\frac{\hbar^2 d}{2l_B^2} \left[ \frac{k_x' \cos(\alpha_W) \sin(\alpha_B)}{m_x} - \frac{k_x' \cos(\alpha_B) \sin(\alpha_W)}{m_y} \right]. \quad (3.35c)$$

Com as Eqs. (3.32) e (3.34) podemos escrever o Hamiltoniano do sistema, tal como

$$H = J_2 \frac{d^2}{dy'^2} + J_1 \frac{d}{dy'} + J_0, \quad (3.36)$$

onde  $J_2 = L_2 + N_2$ ,  $J_1 = L_1 + N_1$  e  $J_0 = L_0 + N_0$ . Podemos simplificar a Eq. (3.36) ao aplicarmos  $H$  na função de onda do tipo

$$\Psi(y') = e^{i\theta_2 y'} \phi(y'), \quad (3.37)$$

resultando na seguinte expressão

$$J_2 \frac{d^2}{dy'^2} \phi(y') + V(y') \phi(y') = E' \phi(y'), \quad (3.38)$$

onde

$$E' = E - \left( J_0 - \frac{1}{4} \frac{J_1^2}{J_2} \right), \quad (3.39)$$

e

$$\theta_2 = \frac{i J_1}{2 J_2}. \quad (3.40)$$

Pela forma que o nosso sistema está organizado, temos que a função de onda tem que ser nula em  $\phi(y' = 0) = \phi(y' = L) = 0$ . Então, com essas condições a solução fica

$$\phi(y') = A_n \sin(\lambda_n y'), \quad (3.41)$$

que, ao substitui-la na Eq. (3.38) obtemos

$$\lambda_n = \sqrt{-\frac{E'}{J_2}} > 0. \quad (3.42)$$

Agora, quando aplicamos a condição  $y' = L$  na Eq. (3.41), obtemos que

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.43)$$

Igualando a Eq. (3.42) com a Eq. (3.43) temos que a energia do sistema é

$$E = -J_2 \frac{n^2 \pi^2}{L^2} + J_0 - \frac{1}{4} \frac{J_1^2}{J_2}, \quad (3.44)$$

ou ainda

$$\begin{aligned} E = & \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2L^2 \Gamma_y(\theta = 0^\circ)} + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_x'^2}{\Gamma_x(\theta = 0^\circ)} + \frac{\hbar^2 d^2}{4l_b^4} \left[ \frac{\sin^2(\alpha_B)}{m_x} + \frac{\cos^2(\alpha_B)}{m_y} \right] \right) \\ & - \frac{\hbar^2 d k_x'}{2l_b^2} \left[ \frac{\cos(\alpha_W) \sin(\alpha_B)}{m_x} - \frac{\cos(\alpha_B) \sin(\alpha_W)}{m_y} \right] \\ & + \frac{\Gamma_y(\theta = 0^\circ)}{2\hbar^2} \left[ -\frac{i\hbar^2}{\Gamma_{xy}(\theta=0)} k_x' + \frac{\hbar^2 d}{2l_B^2} \left[ \frac{\sin(\alpha_W) \sin(\alpha_B)}{m_x} - \frac{\cos(\alpha_B) \cos(\alpha_W)}{m_y} \right] \right]^2, \end{aligned} \quad (3.45)$$

para  $n \in \mathbb{N}^*$ . Com a Eq. (3.46), podemos variar alguns parâmetros e entender como o sistema funciona. Na Fig. 33 apresentamos relações de dispersão para diferentes valores de campo magnético ( $B_0 = 0T$  e  $B_0 = 10T$ ), ângulos de rotação ( $\alpha_W = 0$ ,  $\alpha_W = \pi/4$  e  $\alpha_W = \pi/2$ ), e

ângulo de orientação do campo magnético ( $\alpha_B = 0$ ,  $\alpha_B = \pi/4$  e  $\alpha_B = \pi/2$ ). Observe que quando consideramos  $B_0 = 0$  T chegamos no mesmo resultado da Fig. 28 nos dando mais uma certeza que a Eq. (3.46) está correta. Porém, quando incluímos o campo magnético no sistema, observe que os níveis de energia se modificam sofrendo uma translação em  $k_x$  e que, apenas para  $\alpha_B = 0$ , os níveis de energia se comportam igual ao caso sem  $B_0$ . Este comportamento se repete também quando temos  $\alpha_W = \alpha_B = \pi/4$  e  $\alpha_W = \alpha_B = \pi/2$ . O mesmo comportamento aparece quando variamos o ângulo do fio quântico e fixamos os ângulos do campo magnético. Então, temos uma relação de quando há um alinhamento do fio quântico com o campo magnético, o comportamento dos níveis de energia são os mesmos do caso  $B_0$ .

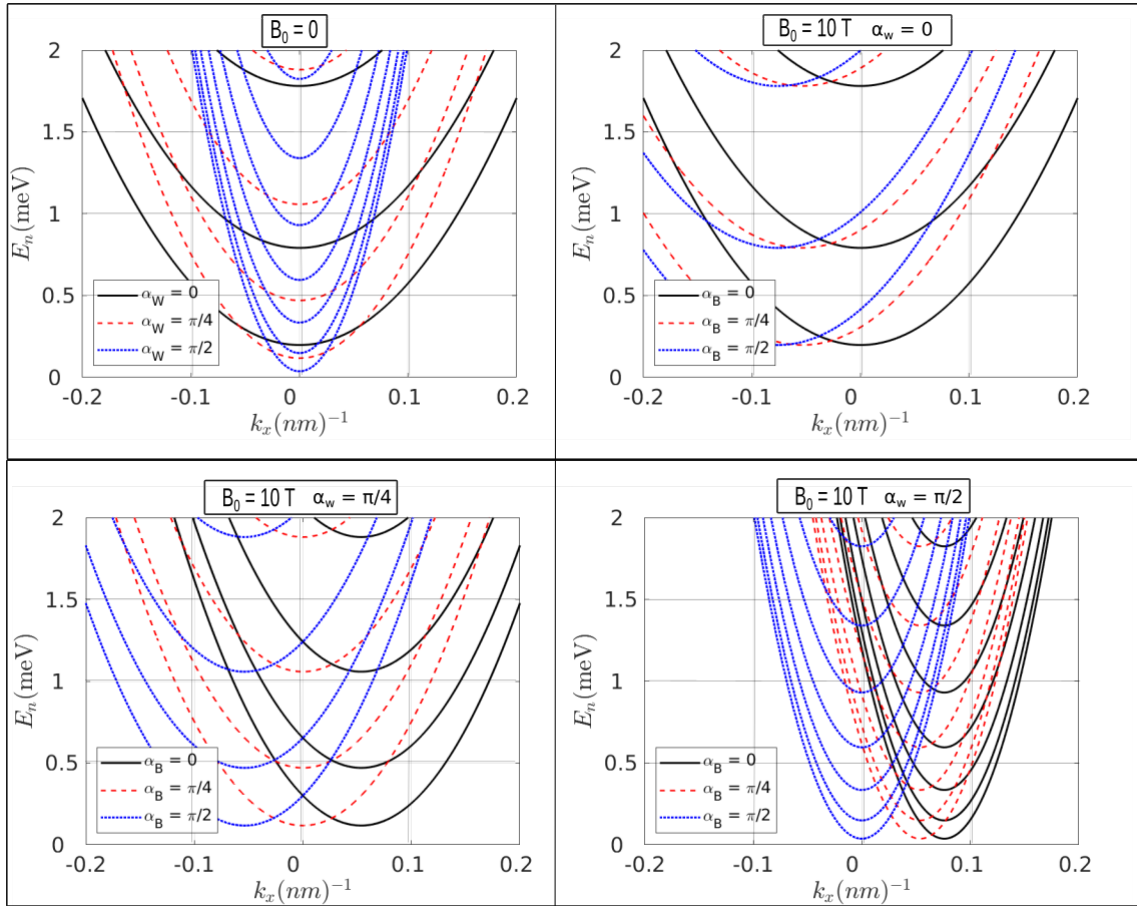


Figura 33 – Relação de dispersão para um fio quântico com largura de  $L = 100$  nm tomando diferentes ângulos de rotação para o fio quântico ( $\alpha_W$ ) enquanto fixamos o ângulo do campo magnético ( $\alpha_B$ ) em algumas direções em relação aos eixos de anisotropia do fosforeno. Observe que ao alinharmos o fio quântico com o campo magnético, a relação de dispersão tende ao caso  $B_0 = 0$  T.

Outra análise que fizemos foi dos níveis de energia em função da largura do fio quântico quando tomamos  $k_x = 0$  nm<sup>-1</sup>, como representado na Fig. 34. Quando  $B_0 = 0$  T, temos o mesmo comportamento da Fig. 27, como se era esperado, os níveis de energia diminuindo

quadraticamente com o aumento da largura do fio, algo já esperado quando fazemos  $k_x = 0$ . Considerando  $B_0 = 500\text{T}$ , vemos que para altos valores de campo magnético, quando o fio quântico e o campo magnético estão alinhados, os níveis de energia se comporta igual ao caso sem campo.

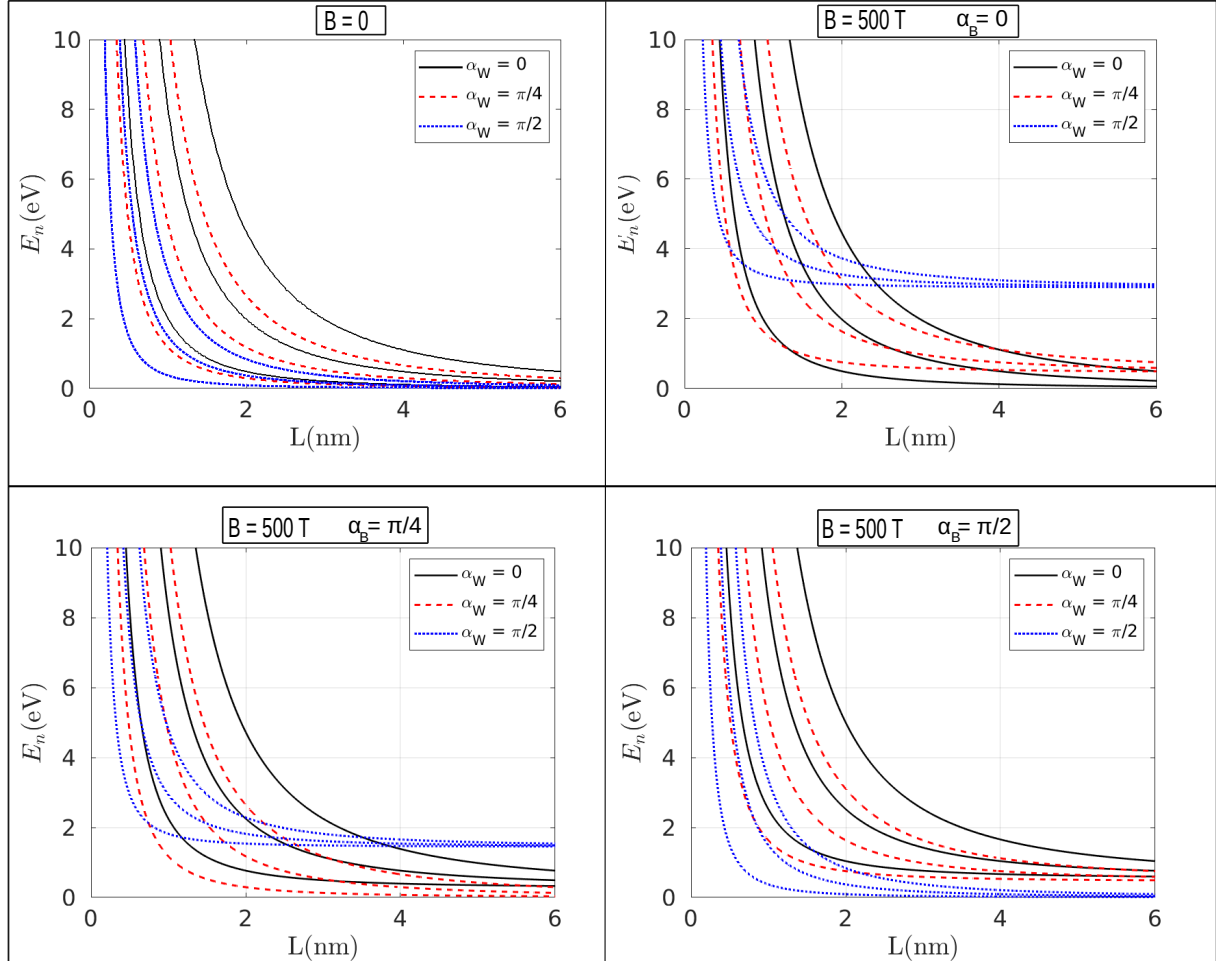


Figura 34 – Níveis de energia em função da largura de fio quântico com  $k_x = 0$  para diferentes ângulos de rotação  $\alpha_W$  e fixando a rotação do campo magnético em relação aos eixos de anisotropia e tomando as massas efetivas da monocamada fosforeno. Observe que ao alinharmos o fio quântico com o campo magnético o sistema tende a se comportar de forma análoga ao caso  $B_0 = 0\text{ T}$ .

Refizemos também o estudo de como a energia varia em relação ao ângulo do fio quântico. Na Fig. 35 plotamos os níveis de energia  $n = 0$  (linhas sólidas) e  $n = 10$  (linhas pontilhadas) para alguns parâmetros. As linhas verdes são para o caso  $B_0 = 0\text{T}$ . Quando consideramos  $B_0 = 10\text{ T}$  e  $\alpha_B = 0$  (linhas pretas), vem-se um aumento nos níveis de energia. Porém, ao variarmos o ângulo  $\alpha_B = \pi/4$  (linhas vermelhas) e  $\alpha_B = \pi/2$  (linhas azuis), vemos que o sistema tende a comporta-se similar com o sistema sem campo magnético.

Então, o que podemos perceber é que o campo magnético no plano, quando é

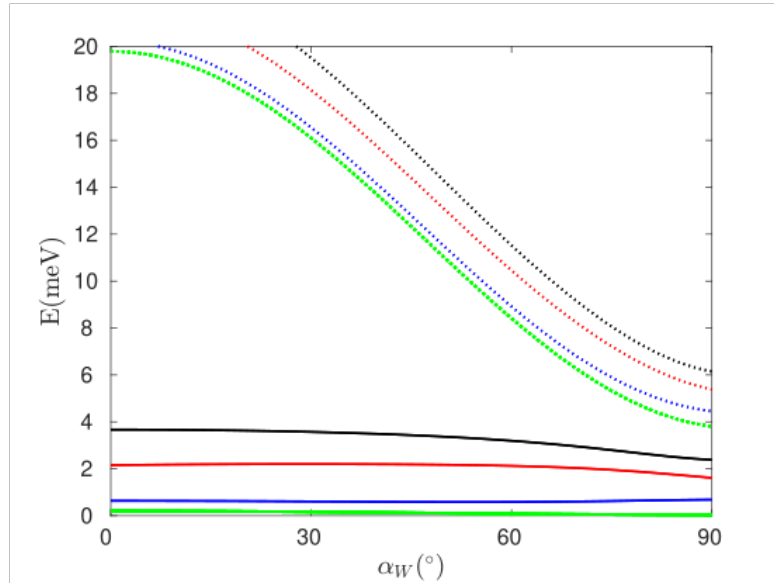


Figura 35 – Níveis de energia considerando  $n = 1$  (linhas sólidas) e  $n = 10$  (linhas pontilhadas) em função do ângulo de rotação  $\alpha_W$  fixando o campo magnético em direções específicas em relação aos eixos de anisotropia para fosforeno. Foi considerado  $L = 100$  nm e  $k_x = 0$ . Observe que ao alinharmos o fio quântico com o campo magnético o sistema tende a se comportar de forma análoga ao caso  $B_0 = 0$  T.

aplicado em um sistema de fio quântico em uma monocamada anisotrópica, altera os níveis de energia e pode controlar essas deformidades dos níveis rotacionando o campo magnético. Entretanto, as energias dadas pela Eq. (3.45) não são físicas. Essa afirmação se deve ao fato do sistema ser constituído por apenas uma camada. Nesse caso, a dependência do Hamiltoniano do sistema com o campo magnético no plano pode ser removido por uma transformação de calibre. Podemos também entender essa conclusão de maneira semi-clássica. Com o campo magnético sendo aplicado no plano da monocamada, temos que a partícula carregada e em movimento sofre uma força de Lorentz na direção perpendicular ao plano. Entretanto, como a partícula não tem para onde ir, temos que o campo magnético no plano não tem qualquer efeito sobre a sua dinâmica. Assim, é importante comentar que esta seção foi desenvolvida no intuito de apresentar de forma didática a solução do problema do campo no plano e para ficar como comparação dos resultados que serão obtidos no próximo capítulo para o caso da bicamada.

## 4 PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE FIOS QUÂNTICOS SEMICONDUTORES ANISOTRÓPICOS DEFINIDOS EM BICAMADAS ROTACIONADAS

Neste capítulo iremos investigar, através da aproximação de massa efetiva de duas bandas, os estados eletrônicos confinados em fios quânticos definidos eletrostaticamente em uma bicamada rotacionada acoplada feita de semicondutores anisotrópicos 2D, isto é, com diferentes massas efetivas ao longo das direções  $x$  e  $y$  e com as duas camadas sendo rotacionada uma em relação à outra.

### 4.1 Bicamada rotacionada

Neste capítulo utilizamos as ferramentas apresentadas nos capítulos anteriores. Iremos considerar as propriedades dos fios quânticos apresentados no Cap. 3 em uma bicamada rotacionada na presença de campos externos explanados no Cap. 2. O sistema será caracterizado da seguinte forma: temos uma bicamada anisotrópica acoplada separada por uma distância  $d$  e que serão rotacionadas entre si através de um ângulo  $\theta$ . Iremos aplicar um campo magnético no plano  $xy$  e iremos mudar sua direção variando o ângulo  $\alpha_B$ . Também iremos considerar um fio quântico de largura  $W$  rotacionado por um ângulo  $\alpha_W$ . Representamos o sistema na Fig. 36.

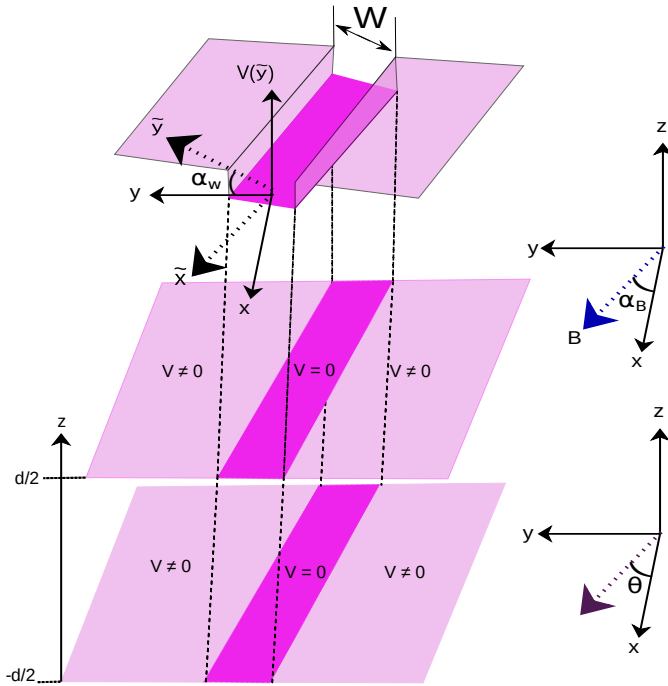


Figura 36 – Representação do fio quântico em uma bicamada anisotrópica rotacionada na presença de um campo magnético no plano.

No Cap. 2, obtivemos que o Hamiltoniano para uma bicamada rotacionada anisotró-

pica acoplada na presença de um campo magnético no plano é dado por

$$H(\vec{k}) = \begin{pmatrix} z_+(\vec{k}) & \Delta \\ \Delta & z_-(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

com  $z_{\pm}(\vec{k}) = L(\vec{k}) \pm N(\vec{k})$ , onde

$$L(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\mu_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2\mu_y} + \frac{\hbar^2 d^2}{8l_B^4} \left( \frac{\sin \alpha_B^2}{\mu_2} + \frac{\cos \alpha_B^2}{\mu_y} \right) + \frac{\hbar^2 d^2}{2\mu_{xy} l_B^2} (-\cos \alpha_B k_x + \sin \alpha_B k_y), \quad (4.2)$$

e

$$N(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{\mu_{xy}} \left( k_x k_y - \frac{d^2 \sin \alpha_B \cos \alpha_B}{l_B^2} \right) + \frac{\hbar^2 d k_x}{2l_B^2} \left( \frac{\sin \alpha_B}{\mu_x} - \frac{\cos \alpha_B}{\mu_y} \right). \quad (4.3)$$

Para descrever o fio quântico, consideramos a presença de um potencial externo em ambas as camadas escrevendo o Hamiltoniano do sistema da seguinte forma

$$H_W(\vec{k}, y''') = \begin{pmatrix} L(\vec{k}) + N(\vec{k}) & \Delta \\ \Delta & L(\vec{k}) - N(\vec{k}) \end{pmatrix} + V(y''') \mathbb{I}_{2 \times 2}, \quad (4.4)$$

onde  $\mathbb{I}$  é a matriz identidade,  $V(y''')$  é o potencial do fio, definido como

$$V(y''') = \begin{cases} 0, & 0 < y''' < W, \\ V_0, & y''' < 0 \text{ e } y''' > W, \end{cases} \quad (4.5)$$

e onde as direções  $x''' - y'''$ , que ditam a direção do fio quântico, são determinadas pelo ângulo  $\alpha_W$ , como indicado na Fig. 36. Podemos ainda escrever  $V(y''')$  da seguinte maneira

$$V(y''') = V_0 \Theta(-y''') + V_0 \Theta(y''' - W), \quad (4.6)$$

sendo  $\Theta(u)$  a função Heaviside e  $V_0 > 0$ .

Observe que o Hamiltoniano (4.4) está escrito em termos de diferentes sistemas de coordenadas. É conveniente passarmos para o sistema de coordenadas do fio quântico através da transformação

$$\begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha_W & -\sin \alpha_W \\ \sin \alpha_W & \cos \alpha_W \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_x''' \\ k_y''' \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Desta forma, o Hamiltoniano do sistema torna-se

$$H_W(\vec{k}', y''') = \begin{pmatrix} L(\vec{k}') + N(\vec{k}') & \Delta \\ \Delta & L(\vec{k}') - N(\vec{k}') \end{pmatrix} + V(y''') \mathbb{I}_{2 \times 2}, \quad (4.8)$$

onde

$$L(\vec{k}''') = \frac{\hbar^2 k_{x'''}^2}{2\Gamma_x} + \frac{\hbar^2 k_{y'''}^2}{2\Gamma_y} + \frac{\hbar^2 k_{x'''} k_{y'''}}{\Gamma_{xy}} + \frac{\hbar^2}{2\mu_{xy}} \frac{d}{l_B^2} [-\cos(\alpha_B + \alpha_W) k_{x'''} + \sin(\alpha_B + \alpha_W) k_{y'''}] \\ + \frac{\hbar^2 d^2}{8l_B^4} \left[ \frac{\sin^2(\alpha_B)}{\mu_x} + \frac{\cos^2(\alpha_B)}{\mu_y} \right], \quad (4.9a)$$

$$N(\vec{k}''') = \frac{\hbar^2 \sin(2\alpha_W)}{2\mu_{xy}} k_{x'''}^2 - \frac{\hbar^2 \sin(2\alpha_W)}{2\mu_{xy}} k_{y'''}^2 + \frac{\hbar^2 \cos(2\alpha_W)}{\mu_{xy}} k_{x'''} k_{y'''} \\ - \frac{1}{\mu_{xy}} \frac{d^2}{l_B^4} \frac{\hbar^2 \sin(\alpha_B) \cos(\alpha_B)}{4} + \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{l_B^2} \left[ \frac{\sin(\alpha_B) \cos(\alpha_W)}{\mu_x} - \frac{\cos(\alpha_B) \sin(\alpha_W)}{\mu_y} \right] k_{x'''} \\ - \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{l_B^2} \left[ \frac{\sin(\alpha_B) \sin(\alpha_W)}{\mu_x} + \frac{\cos(\alpha_B) \cos(\alpha_W)}{\mu_y} \right] k_{y'''}, \quad (4.9b)$$

com

$$\frac{1}{\Gamma_x} = \frac{\cos^2(\alpha_W)}{\mu_x} + \frac{\sin^2(\alpha_W)}{\mu_y}, \quad (4.10a)$$

$$\frac{1}{\Gamma_y} = \frac{\sin^2(\alpha_W)}{\mu_x} + \frac{\cos^2(\alpha_W)}{\mu_y}, \quad (4.10b)$$

$$\frac{1}{\Gamma_{xy}} = \left( \frac{1}{\mu_y} - \frac{1}{\mu_x} \right) \sin(\alpha_W) \cos(\alpha_W). \quad (4.10c)$$

Agora temos uma expressão que contém o ângulo de rotação e a anisotropia do sistema. Vemos que  $[p_{x'''}, H_W(\mathbf{p}''', y''')] = 0$ , e assim, podemos tomar  $p_{y'''} = -i\hbar d/dy'''$  e  $p_{x'''} = \hbar k_{x'''}$  na Eq. (4.8), e obtemos assim

$$H_W(p_{y'''}, y''') = \mathbb{J}_2 \frac{d^2}{dy'''^2} + \mathbb{J}_1 \frac{d}{dy'''} + \mathbb{J}_0 + V(y''') \mathbb{I}_{2 \times 2}, \quad (4.11)$$

onde

$$\mathbb{J}_i = \begin{pmatrix} J_i^{(+)} & 0 \\ 0 & J_i^{(-)} \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, \quad (4.12a)$$

$$\mathbb{J}_0 = \begin{pmatrix} J_0^{(+)} & \Delta \\ \Delta & J_0^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (4.12b)$$

$J_j^{(\pm)} = L_j \pm N_j$ , com  $j = 0, 1, 2$ , e

$$L_2 = -\frac{\hbar^2}{2\Gamma_y}, \quad (4.13a)$$

$$L_1 = -i\hbar^2 \left[ \frac{1}{2\mu_{xy}} \frac{d}{l_B^2} \sin(\alpha_B + \alpha_W) + \frac{k_{x'''}}{\Gamma_{xy}} \right], \quad (4.13b)$$



$$L_0 = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2\Gamma_x} - \frac{\hbar^2}{2\mu_{xy}} \frac{d}{l_B^2} \cos(\alpha_B + \alpha_W) k_x + \frac{\hbar^2 d^2}{8l_B^4} \left[ \frac{\sin^2(\alpha_B)}{\mu_x} + \frac{\cos^2(\alpha_B)}{\mu_y} \right], \quad (4.13c)$$

$$N_2 = \frac{\hbar^2}{2\mu_{xy}} \sin(2\alpha_W), \quad (4.13d)$$

$$N_1 = i\hbar^2 \left[ \frac{d}{2l_B^2} \left( \frac{\sin(\alpha_B) \sin(\alpha_W)}{\mu_x} + \frac{\cos(\alpha_B) \cos(\alpha_W)}{\mu_y} \right) - \frac{\cos(2\alpha_W)}{\mu_{xy}} k_x \right], \quad (4.13e)$$

$$N_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu_{xy}} \left[ \sin(2\alpha_W) k_x^2 - \frac{d^2}{2l_B^4} \sin(\alpha_B) \cos(\alpha_B) \right] + \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{l_B^2} \left[ \frac{\sin(\alpha_B) \cos(\alpha_W)}{\mu_x} - \frac{\cos(\alpha_B) \sin(\alpha_W)}{\mu_y} \right] k_x. \quad (4.13f)$$

Agora, foquemos na equação de Schrödinger independente do tempo para o sistema de interesse

$$H_W(p_y''', y''') \psi(y''') = E \psi(y'''). \quad (4.14)$$

#### 4.1.1 Bicamada na ausência de rotação e do campo magnético

Em primeira análise podemos considerar o sistema sem rotação ( $\theta = 0$ ) e sem campo magnético ( $B_0 = 0$ ). Isso faz com que as Eqs. (2.47a), (2.47b) e (2.47c) fiquem como  $1/\mu_x = 1/m_x$ ,  $1/\mu_y = 1/m_y$  e  $1/\mu_{xy} = 0$ , respectivamente. Consequentemente, das Eqs. (4.10a), (4.10b) e (4.10c), chegamos à

$$\frac{1}{\Gamma_x} = \frac{\cos^2(\alpha_W)}{m_x} + \frac{\sin^2(\alpha_W)}{m_y}, \quad (4.15a)$$

$$\frac{1}{\Gamma_y} = \frac{\sin^2(\alpha_W)}{m_x} + \frac{\cos^2(\alpha_W)}{m_y}, \quad (4.15b)$$

$$\frac{1}{\Gamma_{xy}} = \left( \frac{1}{m_y} - \frac{1}{m_x} \right) \sin(\alpha_W) \cos(\alpha_W). \quad (4.15c)$$

Com isto, os termos  $L_i$  [Eqs. (4.13a)-(4.13c)] ficam

$$L_2 = -\frac{\hbar^2}{2\Gamma_y}, \quad (4.16a)$$

$$L_1 = -\frac{i\hbar^2}{\Gamma_{xy}} k_x''', \quad (4.16b)$$

$$L_0 = \frac{\hbar^2}{2\Gamma_x} k_x'''. \quad (4.16c)$$

Por outro lado, todos os termos  $N_i$  [Eqs. (4.13d)- (4.13f)] são nulos, nos permitindo escrever  $J_i^{(+)} = J_i^{(-)} = L_i$ . Dessa maneira, definindo as quantidades

$$H^{(\pm)} = L_2 \frac{d^2}{dy'''^2} + L_1 \frac{d}{dy'''} + L_0, \quad (4.17)$$

podemos escrever a equação Schrodinger independente do tempo como

$$H\Psi(y''') = E\Psi(y'''), \quad (4.18)$$

com o Hamiltoniano dado por

$$H = \begin{pmatrix} H^{(+)} & \Delta \\ \Delta & H^{(-)} \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Utilizando uma função de onda do tipo

$$\Psi(y''') = e^{i\beta y'''} \phi(y'''), \quad (4.20)$$

na Eq. (4.18), com  $\beta = iL_1/2L_2$ , vamos chegar na seguinte expressão

$$L_2 \mathbb{I}_{2 \times 2} \frac{d^2}{dy'''^2} \phi(y''') + \Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \phi(y''') = E' \phi(y'''), \quad (4.21)$$

onde

$$E' = E - \left( L_0 - \frac{1}{4} \frac{L_1^2}{L_2} \right). \quad (4.22)$$

Como estamos modelando um fio quântico com uma seção transversal tal como um poço infinito, devemos impor que  $\phi(y''' = 0) = \phi(y''' = W) = 0$ . Dessa forma, podemos considerar a seguinte *ansatz*

$$\phi(y''') = \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \sin\left(\frac{n\pi}{W} y'''\right), \quad (4.23)$$

com  $n \in \mathbb{N}^*$ . Substituindo a Eq. (4.23) na Eq. (4.21), chegamos em

$$\left[ -L_2 \mathbb{I}_{2 \times 2} \left( \frac{n\pi}{W} \right)^2 + \Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = E' \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Para termos de  $(A_n \ B_n)^T$  não triviais, devemos impor

$$\det \left[ -L_2 \mathbb{I}_{2 \times 2} \left( \frac{n\pi}{W} \right)^2 + \Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - E' \mathbb{I}_{2 \times 2} \right] = 0, \quad (4.25)$$

ou

$$\det \begin{pmatrix} -L_2 \left( \frac{n\pi}{W} \right)^2 - E' & \Delta \\ \Delta & -L_2 \left( \frac{n\pi}{W} \right)^2 - E' \end{pmatrix} = 0. \quad (4.26)$$

Resolvendo a Eq. (4.26), obtemos

$$E' = -L_2 \left( \frac{n\pi}{W} \right)^2 \pm \Delta. \quad (4.27)$$

Substituindo a Eq. (4.22) na Eq. (4.27), temos a seguinte expressão para a energia do sistema

$$E_n^\pm = E_n^{mono} \pm \Delta, \quad (4.28)$$

onde

$$E_n^{mono} = -L_2 \left( \frac{n\pi}{W} \right)^2 + L_0 - \frac{1}{4} \frac{L_1^2}{L_2}. \quad (4.29)$$

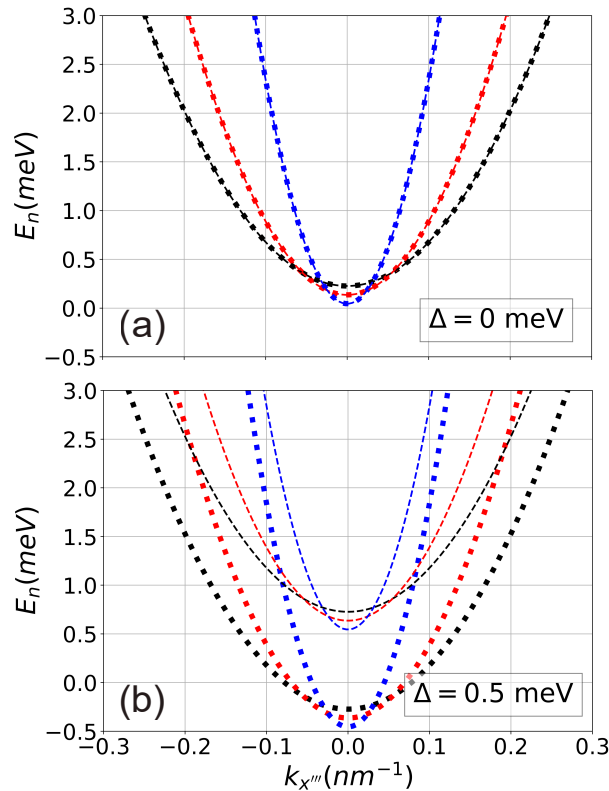


Figura 37 – Níveis de energia mais baixos para as sub-bandas inferiores ( $E_{n=1}^-$  - curvas pontilhadas) e superiores ( $E_{n=1}^+$  - curvas tracejadas) na ausência de campos magnéticos externos (Eq. (4.28) com  $B_0 = 0$ ), tomando (a)  $\Delta = 0$  (bicamada desacoplada 2DEGs) e (b)  $\Delta = 0.5$  meV (bicamada acoplada 2DEGs). As curvas preta, vermelha e azul correspondem ao alinhamento do fio quântico  $\alpha_W = 0$ ,  $\alpha_W = \pi/4$  e  $\alpha_W = \pi/2$ , respectivamente. Aqui, foram considerados  $d = 10$  nm,  $W = 100$  nm e  $\theta = 0$  para a distância entre as camadas, a largura do fio e o ângulo de torção entre as camadas, respectivamente. No painel (a)  $E_{n=1}^+(\Delta = 0) = E_{n=1}^-(\Delta = 0)$ .

Comparando as Eqs. (4.16a)-(4.16c), (4.29) com a Eq. (3.12), vemos que  $E_n^{mono}$  são as energias obtidas em (CUNHA; AL., 2020) para um fio quântico em monocamada de fosforeno. Dessa maneira, as energias (4.28) para um fio quântico em uma bicamada não rotacionada de materiais anisotrópicos, na ausência de campo magnético, são dadas por  $E_n^{mono}$  com o acréscimo do termo  $\pm\Delta$ . Na Fig. 37 mostramos os gráficos de  $E_{n=1}^{\pm}$  para (a)  $\Delta = 0$ , (b)  $\Delta = 0.5$  meV, e para alguns valores de  $\alpha_W$ . Em (a) temos o comportamento descrito por (CUNHA; AL., 2020) e em (b) temos que acoplamento entre as camadas produz, nesse caso específico, uma quebra da degenerescência de camada.

#### 4.1.2 Bicamada acoplada com campo magnético

Nesta subseção vamos analisar o caso da bicamada anisotrópica acoplada com campo magnético no plano  $xy$ , mas mantendo o sistema sem rotação entre as camadas ( $\theta = 0$ ). Diferente da subseção anterior onde encontramos uma equação analítica, aqui não encontramos e recorreremos para cálculos numéricos. Dessa maneira, para investigarmos as propriedades microeletrônicas do sistema, utilizaremos o método das diferenças finitas, como vimos no Cap. 3. Discretizamos a variável  $y'''$  como  $y_i''' \equiv \{y_0''', y_1''', y_2''', \dots, y_{\gamma-1}''', y_{\gamma}'''\}$ , com  $\gamma + 1$  pontos no *grid*, e tomando

$$\frac{d^2\psi(y''')}{dy'''^2} \rightarrow \ddot{\psi}_i \approx \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta y''')^2}, \quad (4.30a)$$

$$\frac{d\psi(y''')}{dy'''} \rightarrow \dot{\psi}_i \approx \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{2\Delta y'''}, \quad (4.30b)$$

$$V(y''')\psi(y''') \rightarrow V_i\psi_i, \quad (4.30c)$$

onde  $\psi_i = \psi(y_i''')$  e  $\psi_0 = \psi_{\gamma} = 0$ . Podemos reescrever a Eq. (4.14) como

$$\left\{ \mathbb{I}_{(\gamma-1) \times (\gamma-1)} \otimes \mathbb{D} + \mathbb{Z}_{(\gamma-1) \times (\gamma-1)}^u \otimes \mathbb{A}_+ + \mathbb{Z}_{(\gamma-1) \times (\gamma-1)}^d \otimes \mathbb{A}_- + \mathbb{V}_{(\gamma-1) \times (\gamma-1)} \otimes \mathbb{I}_{2 \times 2} \right\} \Psi = E\Psi, \quad (4.31)$$

sendo  $\otimes$  o produto de Kronecker entre duas matrizes,  $\mathbb{Z}_{(\gamma-1) \times (\gamma-1)}^u$  e  $\mathbb{Z}_{(\gamma-1) \times (\gamma-1)}^d$  são matrizes quadradas cujos elementos são dados por  $Z_{m,n}^u = \delta_{m,n-1}$  and  $Z_{m,n}^d = \delta_{m-1,n}$  ( $m, n = 1, 2, \dots, \gamma-1$ ), respectivamente,  $\Psi = (\psi_1 \ \psi_2 \ \psi_3 \ \dots \ \psi_{\gamma-1})^T$ , e

$$\mathbb{D} = -\frac{2}{(\Delta y''')^2} \mathbb{J}_2 + \mathbb{J}_0, \quad (4.32a)$$

$$\mathbb{A}_{\pm} = \frac{1}{(\Delta y''')^2} \mathbb{J}_2 \pm \frac{1}{2\Delta y'''} \mathbb{J}_1, \quad (4.32b)$$

$$\mathbb{V}_{(\gamma-1) \times (\gamma-1)} = \begin{pmatrix} V_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & V_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & V_{\gamma-1} \end{pmatrix}. \quad (4.32c)$$

Resolvemos a Eq. (4.31) para o caso de um sistema isotrópico com campo magnético variando no plano mantendo o fio quântico e as camadas sem rotação ( $\alpha_W = \theta = 0$ ), como mostramos no painel da Fig. 38. Na Fig. 38(a) temos um sistema com  $B_0 = 0$  T e consideramos apenas o acoplamento entre as camadas de  $\Delta = 0.5\text{meV}$ . Para o caso (b) incluímos um campo magnético  $B = 10T$  na direção  $\alpha_B = 0$ , e observamos surgimento de sub-bandas. Ambos os resultados corroboram com o que mostramos nos capítulos anteriores.

Porém, note que a partir da Fig. 38(c), com a variação de  $\vec{B}$ , as curvaturas das parábolas começam a distorcer. Vemos o surgimento de *crossing* e *anticrossing* na Figs. 38(c)-38(f), como a formação de dois vales nas bandas mais energéticas vistas nas Figs. 38(c)-38(e), mas quando  $\vec{B} = \pi/2$  esse vales somem e temos um sistema onde alguns níveis de energia são representados por uma maior curvatura enquanto outros níveis de energia têm uma curvatura menor.

Esse ponto é interessante, pois como estamos trabalhando com a aproximação da massa efetiva, definimos que a massa efetiva do sistema é inversamente proporcional a derivada segunda da energia em relação ao momento [Eq. 1.9], ou, seja, a massa efetiva depende da curvatura das bandas de energias. Como mostramos na Fig. 38 que ao variarmos o campo magnético temos, em um sistema isotrópico, a variação da concavidade das bandas. Então, como citado, na Fig. 38(f) teríamos que para as bandas com maior curvatura uma massa efetiva enquanto para as bandas com menor curvatura outra massa efetiva.

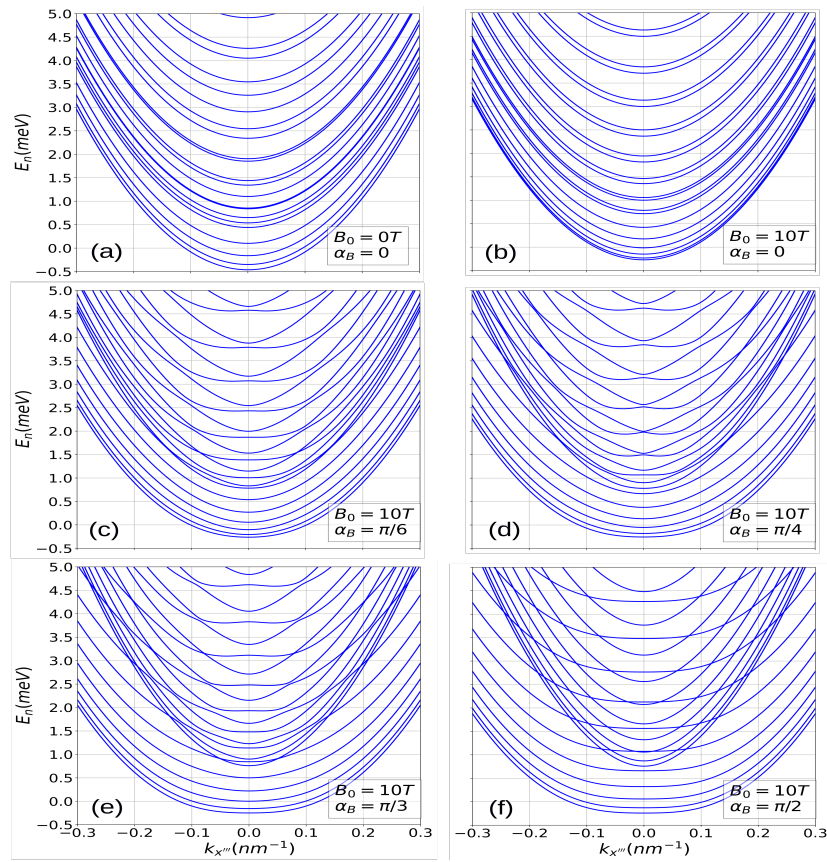


Figura 38 – Gráficos de  $E_n(k_x'')$  para vários valores de  $B_0$  e  $\alpha_B$ , e  $\theta = \alpha_W = 0$  fixos. Nesta figura consideramos  $d = 10$  nm,  $W = 100$  nm e  $\Delta = 0,5$  meV. As massas efetivas consideradas são as de um sistema isotrópico:  $m_x = m_y = m_e$ , onde  $m_e$  é a massa do elétron livre.

## 5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Utilizando a aproximação da massa efetiva, neste trabalho descrevemos fios quânticos anisotrópicos em bicamada rotacionada acoplada na presença de campos externos. Fizemos um estudo inicial de um sistema infinito para bicamada e analisamos como se comportava as energias do sistema quando variamos parâmetros como: (i) rotação das camadas, (ii) rotação do fio quântico, (iii) rotação do campo magnético e (iii) aplicação do campo elétrico. Na ausência de campos externos, a degenerescência do sistema é quebrada quando consideramos o acoplamento entre as camadas e, o sistema de uma banda se torna um sistema de duas bandas. Outra forma de quebrar a degenerescência foi aplicando campos externos no sistema. Com a variação do campo magnético no plano foi visto que os espectros de energia rotacionam conforme variamos a direção do campo. O próximo passo do trabalho foi analisar o comportamento dos estados eletrônicos de fios quântico anisotrópicos em monocamada de fósforo negro. Aqui refizemos os cálculos e os gráficos do trabalho desenvolvido na referência (CUNHA; AL., 2020), por fins de adquirir conhecimento sobre o assunto. Como extensão do trabalho, analisamos um sistema similar, que ao invés de aplicarmos um campo magnético perpendicular, como (CUNHA; AL., 2020) fez, consideramos o campo no plano com uma direção variável.

Na parte final do trabalho estudamos as propriedades eletrônicas de fios quânticos semicondutores anisotrópicos definidos em bicamadas acopladas rotacionadas. Particularmente, juntamos o Hamiltoniano descrito no Cap. 2 com o potencial eletrostático descrito no Cap. 3 e construímos o Hamiltoniano do nosso sistema. Mostramos como o campo magnético interfere diretamente na iso/anisotropia do sistema. Quando consideramos um sistema sem rotação das camadas, sem campo magnético e sem o acoplamento, nosso cálculo número nos devolveu as energias encontradas por (CUNHA; AL., 2020). Quando consideramos o acoplamento, o sistema se comportou como um sistema de monocamada, porém, com um *shift* nas subbandas. Mostramos que para um caso isotrópico, além do  $\vec{B}$  separar os níveis em subbandas, ele deforma as parábolas que representam os níveis de energia. Como a massa efetiva do sistema depende da curvatura das bandas de energia, temos que o campo magnético modifica essas massas.

Portanto, as propriedades eletrônicas do sistema de bicamada rotacionada anisotrópica dependem fortemente da rotação entre as camadas, da intensidade e da variação da direção do campo magnético no plano, afetando a concavidade das bandas de energia e consequentemente, as massas efetivas do sistema. Considerando essas características, como extensão de trabalho, procuraremos estudar o efeito que a rotação entre as camadas, rotação do fio quântico e

a variação do campo magnético causam na estrutura de bandas e nas funções de onda do sistema.



## REFERÊNCIAS

- ALESHKIN, V. Y.; BEKIN, N. A. The conduction band and selection rules for interband optical transitions in strained and heterostructures. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 9, n. 23, p. 4841, 1997.
- ALMEIDA, A. R. **Transporte de pacote de ondas em fios quânticos não ramificados e ramificados**. Dissertação (Dissertação de Mestrado) – Instituto de Física, Universidade Federal de Mato Grosso, 2016.
- AMORESI, R. A. C. **Gás de elétron bidimensional (2DEG) na interface SrTiO<sub>3</sub>/LaAlO<sub>3</sub>**. Tese (Doutorado) – Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista, 2018.
- ANDO, T.; NAKAYAMA, M.; HOSODA, M. Stability of electron-hole plasma in type-i and type-ii gaas-gaalas single quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 69, p. 165316, Apr 2004.
- BARNHAM, K.; VVEDENSKY, D. **Low-dimensional semiconductor structures**. [S. l.: s. n.], 2001.
- BARTICEVIC, Z.; AL. et. Perturbation potential produced by a monolayer of inas on gaas (100). **Physical Review B**, v. 68, n. 15, p. 155306, 2003.
- BELL, W. W. **Special Functions for Scientists and Engineers**. Mineola, NY: Dover Publications, 2004.
- BJÖRK, M. T.; AL. et. Nanowire resonant tunneling diodes. **Applied Physics Letters**, v. 81, n. 23, p. 4458–4460, 2002.
- CALLISTER, W. D.; JR; RETHWISCH, D. G. **Ciência e Engenharia dos Materiais – uma Introdução**. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012.
- CHAVES, A. **Confinamento em fios quânticos semicondutores**. Dissertação (Dissertação de mestrado) – Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 2007.
- CHOI, H.-J.; AL. et. Self-organized GaN quantum wire UV lasers. **The Journal of Physical Chemistry B**, v. 107, n. 34, p. 8721–8725, 2003.
- COSTA, D. R. **Anéis quânticos semicondutores ideais**. Dissertação (Dissertação de mestrado) – Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 2011.
- CUNHA, S. M.; AL. et. Electronic and transport properties of anisotropic semiconductor quantum wires. **Physical Review B**, v. 102, n. 4, p. 045427, 2020.
- DAI, J.; ZENG, X. C. **Titanium trisulfide monolayer: theoretical prediction of a new direct-gap semiconductor with high and anisotropic carrier mobility**. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 54, n. 26, p. 7572–7576, 2015.
- DAVIES, J. H. **The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction**. [S. l.]: Cambridge University Press, 1998.
- DIMITRIJEV, S. **Principles of Semiconductor Devices**. [S. l.]: Oxford University Press, USA, 2012.

- DÁVILA, M. E.; AL. et. Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene. **New Journal of Physics**, v. 16, n. 9, p. 095002, 2014.
- ESAKI, L.; CHANG, L. L. New transport phenomenon in a semiconductor “superlattice”. **Physical Review Letters**, v. 33, n. 8, p. 495, 1974.
- ESAKI, L.; TSU, R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. **IBM Journal of Research and Development**, v. 14, n. 1, p. 61–65, 1970.
- FILHO, J. R. O. S. **Sobre a validade da solução de Penrose para o problema da iluminação dentro do contexto da mecânica quântica**. 77 p. Dissertação (Dissertação (Mestrado em Física)) – Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá, 2022.
- GANGOPADHYAY, S.; NAG, B. R. Energy levels in finite barrier triangular and arrowhead-shaped quantum wires. **Journal of Applied Physics**, v. 81, n. 12, p. 7885–7889, 1997.
- GE, S.; AL. et. Dynamical evolution of anisotropic response in black phosphorus under ultrafast photoexcitation. **Nano Letters**, v. 15, n. 7, p. 4650–4656, 2015.
- HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. **Inorganic Chemistry**. 4th. ed. London: Pearson, 2012.
- HU, J.; MACDONALD, A. H. Electronic structure of parallel two-dimensional electron systems in tilted magnetic fields. **Physical Review B**, v. 46, n. 19, p. 12554, 1992.
- JARIWALA, B.; AL. et. Synthesis and characterization of res<sub>2</sub> and rese<sub>2</sub> layered chalcogenide single crystals. **Chemistry of Materials**, v. 28, n. 10, p. 3352–3359, 2016.
- JR, J. M. P.; AL. et. Confined states and direction-dependent transmission in graphene quantum wells. **Physical Review B**, v. 74, n. 4, p. 045424, 2006.
- JÚNIOR, F. F. B. **Propriedades termodinâmicas, eletrônicas e de transporte de sistemas curvos semicondutores**. Tese (Tese de Doutorado) – Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 2014.
- KALANTARI, M. H.; ZHANG, X. Thermal transport in 2d materials. **Nanomaterials**, v. 13, n. 1, p. 117, 2022.
- KATSNELSON, M. I. Graphene: carbon in two dimensions. **Materials Today**, v. 10, n. 1-2, p. 20–27, 2007.
- KIM, D. H.; AL. et. Single-electron transistor based on a silicon-on-insulator quantum wire fabricated by a side-wall patterning method. **Applied Physics Letters**, v. 79, n. 23, p. 3812–3814, 2001.
- KITTEL, C. **Introdução à Física do Estado Sólido**. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2016.
- KONG, L.; JIANG, Z.; LAI, H. H.; NICHOLLS, R. J.; XIAO, T.; JONES, M. O.; EDWARDS, P. P. J. catal. v. 293, p. 116, 2012.
- LAUHON, L. J.; AL. et. Epitaxial core–shell and core–multishell nanowire heterostructures. **Nature**, v. 420, n. 6911, p. 57–61, 2002.
- LI, L.; AL. et. 2d gep: an unexploited low-symmetry semiconductor with strong in-plane anisotropy. **Advanced Materials**, v. 30, n. 14, p. 1706771, 2018.

- MACHADO, G. M. **Recuperando o uso da aproximação de massa efetiva em perovskitas híbridas de baixa dimensionalidade por meio da aproximação de bandas não parabólicas**. Dissertação (Dissertação de mestrado) – Universidade Federal de Alfenas, Minas Gerais, 2019.
- MILLER, B. I.; AL. et. Quantum wires in InGaAs/InP fabricated by holographic photolithography. **Applied Physics Letters**, v. 54, n. 2, p. 188–190, 1989.
- MONIZ, S. J. A.; SHEVLIN, S. A.; MARTIN, D. J.; GUO, Z.-X.; TANG, J. Energy environ. sci. v. 8, p. 731, 2015.
- MOURÃO, H. A. J. L.; JUNIOR, W. A.; RIBEIRO, C. Mater. chem. phys. v. 135, p. 524, 2012.
- NETO, A. H. C.; AL. et. The electronic properties of graphene. **Reviews of Modern Physics**, v. 81, n. 1, p. 109, 2009.
- NOVOSELOV, K. S.; AL. et. Electric field effect in atomically thin carbon films. **Science**, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.
- PADOVA, P. D.; AL. et. 24 h stability of thick multilayer silicene in air. **2D Materials**, v. 1, n. 2, p. 021003, 2014.
- RADISAVLJEVIC, B.; AL. et. Single-layer MoS<sub>2</sub> transistors. **Nature Nanotechnology**, v. 6, n. 3, p. 147–150, 2011.
- RAHMAN, M.; DAVEY, K.; QIAO, S. Advent of 2d rhenium disulfide (ReS<sub>2</sub>): fundamentals to applications. **Advanced Functional Materials**, v. 27, n. 10, p. 1606129, 2017.
- ROGERS, B.; ADAMS, J.; PENNATHUR, S. **Nanotechnology: Understanding Small Systems**. [S. l.]: CRC Press, 2014.
- SERPONE, N.; BORGARELLO, E.; GRÄTZEL, M. Visible light induced generation of hydrogen from H<sub>2</sub>S in mixed semiconductor dispersions; improved efficiency through inter-particle electron transfer. **Journal of the Chemical Society, Chemical Communications**, n. 6, p. 342–344, 1984.
- SILVA, J. C. **Confinamento quântico em hetero-estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade**. Tese (Tese de Doutorado) – Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 2008.
- SIMON, S. H. **The Oxford Solid State Basics**. [S. l.]: OUP Oxford, 2013.
- STANESCU, T. D.; LUTCHYN, R. M.; SARMA, S. D. Soft superconducting gap in semiconductor-based majorana nanowires. **Physical Review B**, v. 90, n. 8, p. 085302, 2014.
- SUN, Y.; AL. et. An electrostatic model of split-gate quantum wires. **Journal of Applied Physics**, v. 77, n. 12, p. 6361–6369, 1995.
- WANG, W. I.; STERN, F. Valence band offset in alas/gaas heterojunctions and the empirical relation for band alignment. **Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena**, v. 3, n. 4, p. 1280–1284, 1985.
- YANG, M.; AL. et. Intrinsic carrier mobility of monolayer ges and gese: First-principles calculation. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, v. 118, p. 113877, 2020.

YANG, Y.; AL. et. In-plane optical anisotropy of low-symmetry 2d gese. **Advanced Optical Materials**, v. 7, n. 4, p. 1801311, 2.

ZHANG, J.; XU, Q.; FENG, Z.; LI, M.; LI, C. *Angew. chem., int. ed. engl.* v. 47, p. 1766, 2008.

ZHAO, J.; AL. et. Recent advances in anisotropic two-dimensional materials and device applications. **Nano Research**, v. 14, p. 897–919, 2021.