

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**EFEITOS DAS INTERAÇÕES ELÉTRON-ELÉTRON E
SPIN-ÓRBITA NAS PROPRIEDADES MAGNETO-
ELETRÔNICAS E DE MAGNETO-TRANSPORTE DE
SISTEMAS CONFINADOS**

Carlos Fernando Destefani

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação
em Física da Universidade Federal de São Carlos
para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Gilmar Eugenio Marques

**Coorientadores: Prof. Dr. José David Manguiera Vianna
(UnB, Brasília, DF)**

**Prof. Dr. Sergio Eduardo Ulloa
(Ohio University, Athens, OH (EUA))**

São Carlos – SP

Outubro – 2003

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

D476ei

Destefani, Carlos Fernando.

Efeitos das interações elétron-elétron e spin-órbita nas propriedades magneto-eletrônicas e de magneto-transporte de sistemas confinados / Carlos Fernando Destefani . -- São Carlos : UFSCar, 2004.

111 p.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2003.

1. Física da matéria condensada. 2. Ponto quântico. 3. Efeitos Rashba e Dresslhaus. 4. Tunelamento (física). I. Título.

CDD: 530.41 (20^a)

*Os únicos obstáculos realmente intransponíveis são
aqueles que nós mesmos nos impomos.*

Agradecimentos

Ao Prof. Sergio Ulloa por toda ajuda a mim dispensada no período vivido em Athens, e ao Grupo de Nanociências da Ohio University. Ter a primeira experiência internacional sob sua supervisão foi algo que, sem dúvida, facilitou muito minha estadia em Ohio.

Aos demais amigos deixados em Athens: Jose, Whei, Andreas, Américo, Di Prinzio, Aparna, Hong, Ameenah, Sasha, Horácio, Nancy, Candy, Hamad, Cris, Suhita,

Ao Prof. David Vianna, por ter conduzido o desenvolvimento de parte do formalismo desta tese, e ter tido muita paciência nas explicações de certos tópicos.

Ao Prof. Gilmar Marques, não só por ter me orientado desde o Mestrado, como também pela amizade desenvolvida nesses últimos seis longos anos.

À toda galera do Departamento de Física: William, Marcelo, Denilson, Moreira, Rita, Eduardo, Graça, Edmar, Sérgio, Débora, Wellington, Wagner, Celso, Roberto, Fabiano, Marcos, Gilberto, Sandra, Picinin, Antonio Carlos, Sílvio, José Maria, Luís,

Aos amigos de ‘música & peso’ de minha terrinha natal: Paulo, Régis & Cia.

À toda minha família: Paulo, Júlio, Hugo, Seu Hugo e, principalmente, Dona Cida. Sem esquecer Célia, Dani, Camila, Paulinho, Selma, e o recém-chegado Murilo.

E, obviamente, à Fapesp, sem a qual esse Doutorado não teria sido possível.

Resumo

Efeitos da interação elétron-elétron direta e de troca, de um campo magnético externo, da simetria da região de confinamento dos portadores de carga, do raio dessa região, do fator g do material e das possíveis formas de interação *spin*-órbita em materiais com estrutura zinblende, são abordados nas propriedades eletrônicas e de transporte de pontos quânticos semicondutores (ilhas) populadas por muitas partículas. Três distintos tipos de potenciais confinantes são considerados: esférico, parabólico, e quasi-unidimensional, os quais, respectivamente, definem uma ilha tridimensional, bidimensional, e unidimensional; o primeiro é mais apropriado para a descrição de pontos quânticos formados em matrizes vítreas, enquanto os dois últimos descrevem melhor pontos quânticos litograficamente definidos em um gás de elétrons bidimensional.

Propriedades de transporte só não são consideradas no caso parabólico. Nos demais casos, assumimos que a corrente eletrônica se dê em regime balístico e coerente de tunelamento ressonante, com participação essencial dos estados excitados da respectiva simetria. Comprovamos que diferentes geometrias induzem distintos ordenamentos de níveis da ilha e mostramos que, em adição ao bloqueio de *spin* usual, existe um outro mecanismo de bloqueio que influi na corrente do sistema, o qual rotulamos como bloqueio orbital por ser devido essencialmente ao confinamento geométrico da estrutura.

Calculamos o espectro eletrônico do sistema de muitas partículas de acordo com sua simetria. No caso esférico, usamos primeiramente o esquema de acoplamento **LS** para obter os auto-estados de uma ilha populada por até 3 elétrons, seguindo as regras de adição dos momentos angulares totais orbital L e de *spin* S , e consideramos intensidades do campo magnético que nos permitam desprezar sua contribuição diamagnética; a interação elétron-elétron é tratada como uma perturbação à maneira Hartree-Fock. Em seguida, nessa mesma simetria, usamos os métodos matriciais de Roothaan e Pople-Nesbet para lidarmos com ilhas populadas por até 40 elétrons, onde o espectro de adição é calculado e a regra de Hund verificada; mostramos como um campo magnético é capaz de violar essa regra. A vantagem dessa abordagem numérica é que podemos lidar com um número muito maior de partículas; a desvantagem é que nem sempre os estados que essa teoria fornece são autoestados com L e S definidos, como ocorre no acoplamento **LS**.

No caso parabólico, realizamos uma diagonalização numérica para a obtenção dos auto-estados de uma ilha populada por até 2 elétrons, sem restrições quanto à intensidade do campo magnético e nem quanto ao raio do sistema, e levando-se em conta ambos os acoplamentos *spin*-órbita possíveis, sendo um relativo à ausência implícita de simetria de inversão da estrutura cristalina zinblende (efeito Dresselhaus), e outro relativo à ausência de simetria de inversão estrutural causada pelo confinamento que define o gás de elétrons bidimensional (efeito Rashba); analisamos os campos magnéticos críticos onde esses dois efeitos causam uma mistura intrínseca dos *spins* na ilha, induzindo anticruzamentos de níveis no espectro Fock-Darwin onde intensos processos *spin-flip* ocorrem. Já no caso quasi-unidimensional, apenas reproduzimos um espectro já conhecido para uma ilha populada por até 4 elétrons.

Abstract

Effects of the direct and exchange electron-electron interaction, external magnetic field, symmetry of the charge carriers confining potential, radius, material g -factor, and also of the spin-orbit interaction in zincblende structure materials, are treated on the electronic and transport properties of semiconductor quantum dots (islands) charged by many particles. Three distinct kinds of confining potentials are considered: spherical, parabolic, and quasi-one-dimensional which, respectively, define a three-dimensional, two-dimensional, and one-dimensional island; the first one is more appropriated for the description of quantum dots formed in glassy matrices, while the last two better describe quantum dots lithographically defined in a two-dimensional electron gas.

Transport properties are considered in the spherical and quasi-one-dimensional islands, where we assume that the electronic current is in the resonant tunneling ballistic and coherent regimes, with essential role played by the excited states of the specific symmetry. We show that different geometries induce distinct level ordering in the island and that there is, in addition to the usual spin blockade, another kind of blockade mechanism which influences the system current; we label it by orbital blockade, because it is essentially due to the structure geometric confinement.

We calculate the electronic spectrum of the many-particle system according to its symmetry. In the spherical case, we firstly use the **LS**-coupling scheme in order to obtain the eigenstates of an island charged by 3 electrons, following the orbital L and spin S total angular momentum addition rules; we consider intensities of the magnetic field that allow us to neglect its diamagnetic contribution; the electron-electron interaction is treated as a perturbation in a Hartree-Fock way. In the following we use, in this same symmetry, the Roothaan and Pople-Nesbet matrix methods in order to deal with islands charged by 40 electrons, where the addition spectrum is calculated and Hund's rule is verified; we show how a magnetic field is able to violate such rule. The advantage of this numerical approach is the possibility to deal with a very high occupation in the island; the disadvantage is that their eigenstates do not have defined L and S values, as it is the case in the **LS**-coupling scheme.

In the parabolic case, we employ a numerical diagonalization in order to obtain the island eigenstates charged by 2 electrons, without any restrictions regarding the magnetic field intensity or the system radius; we take into account both possible spin-orbit couplings, one related to the implicit absence of zincblende crystalline structure inversion symmetry (Dresselhaus effect), and the other one related to the absence of structure inversion symmetry as caused by the confinement defining the two-dimensional electron gas (Rashba effect); we analyze the critical magnetic fields where both effects give origin to a intrinsic spin mixture in the island, inducing level anticrossings in the Fock-Darwin spectrum where intense spin-flips processes occur. In the quasi-one-dimensional case, we just reproduce a known spectrum for an island charged by 4 electrons.

Lista de Artigos

Electronic transport in quasi-1D mesoscopic systems: the correlated electron approach, C. F. Destefani, G. E. Marques, *Physica E* **7**, 786 (2000).

Transport properties in spherical quantum dots: orbital-blockade and spin-blockade effects, C. F. Destefani, G. E. Marques, C. Trallero-Giner, *Phys. Rev. B* **65**, 235314 (2002).

Spin-orbit coupling and intrinsic spin mixing in quantum dots, C. F. Destefani, Sergio. E. Ulloa, G. E. Marques, submetido ao *Phys. Rev. B*.

Spin-orbit and electronic interactions in narrow-gap quantum dots, C. F. Destefani, S. E. Ulloa, G. E. Marques, submetido ao *Phys. Rev. B*.

Multichannel field-effect spin barrier selector, G. E. Marques, A. C. Bittencourt, C. F. Destefani, S. E. Ulloa, submetido ao *Phys. Rev. Lett.*.

The violation of Hund's rule in semiconductor artificial atoms, C. F. Destefani, J. D. M. Vianna, G. E. Marques, submetido ao *Semicond. Sci. Technol.*.

Restricted and unrestricted Hartree-Fock approaches for addition spectrum and Hund's rule of spherical quantum dots in a magnetic field, C. F. Destefani, J. D. M. Vianna, G. E. Marques, submetido ao *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*.

Índice

I	Introdução	6
1.1	Considerações gerais	7
1.2	Motivações para o estudo do transporte eletrônico	8
1.3	Motivações para o estudo do espectro eletrônico	10
1.4	Motivações para o estudo da interação <i>spin</i> -órbita	13
1.5	Escopo da tese	15
II	Mecanismos de bloqueio nas propriedades de transporte de um ponto quântico esférico	16
2.1	Hamiltoniano geral	16
2.2	Taxas de transição	18
2.3	Espectro Hartree-Fock de uma ilha esférica	20
2.4	Propriedades de transporte de uma ilha esférica	27
2.5	Bloqueios orbital e de <i>spin</i> e corrente negativa	32
2.6	Efeitos do campo magnético na corrente	36
2.7	Interação elétron-fônon	40
2.8	Ponto quântico unidimensional	40
2.9	Considerações	41
III	Abordagem Hartree-Fock autoconsistente para sistemas confinados	43
3.1	Expressões gerais	44
3.2	Formalismo Restrito de Roothaan	45
3.3	Formalismo Irrestrito de Pople-Nesbet	48
3.4	Aplicação: ponto quântico esférico com 40 elétrons	52
3.5	Resultados	54

3.6	Considerações	59
IV	Interação <i>spin</i>-órbita em pontos quânticos	61
4.1	Espectro Fock-Darwin	62
4.2	Interação <i>spin</i> -órbita do tipo Rashba	63
4.3	Interação <i>spin</i> -órbita do tipo Dresselhaus	64
4.4	Interação elétron-elétron e Hamiltoniano total	66
4.5	Regras de seleção, campo crítico e sinal do fator g	67
4.6	Resultados para um ponto quântico de 1 elétron	68
4.6.1	Espectro Fock-Darwin puro	69
4.6.2	Efeitos do termo Rashba diagonal	70
4.6.3	Efeitos do termo Rashba não-diagonal	72
4.6.4	Inclusão simultânea de ambos os termos Rashba	72
4.6.5	Efeitos do termo Dresselhaus cúbico	74
4.6.6	Efeitos do termo Dresselhaus linear	75
4.6.7	Inclusão simultânea de ambos os termos Dresselhaus	76
4.6.8	Inclusão simultânea de todas as interações <i>spin</i> -órbita	77
4.6.9	Cancelamento dos acoplamentos <i>spin</i> -órbita	78
4.7	Influência de diferentes raios e larguras do ponto quântico	80
4.8	Ponto quântico com 2 elétrons interagentes	84
4.9	Considerações	89
V	Conclusão	91
A	Taxas de transição	94
B	Acoplamentos <i>spin</i>-órbita	102

Lista de Figuras

1.1	Representação geométrica esquemática do sistema abordado nesta tese.	9
1.2	Processo de fabricação de um PQ vertical.	12
2.1	Níveis de energia para $N = 1, 2$ e 3 partículas de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 500 \text{ \AA}$	25
2.2	Níveis de energia para $N = 1, 2$ e 3 partículas de um PQ esférico de GaAs com raio $R_0 = 90 \text{ \AA}$	26
2.3	Aspectos gerais das curvas de transporte de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 150 \text{ \AA}$, em diferentes temperaturas e a campo magnético nulo.	28
2.4	Aspectos gerais das curvas de transporte de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 500 \text{ \AA}$, em diferentes temperaturas e a campo magnético nulo.	30
2.5	Influência da voltagem <i>gate</i> na corrente de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 500 \text{ \AA}$, na ausência de campo magnético.	31
2.6	Análise de populações mostrando os estados que têm papel na formação da corrente da primeira curva ($V_G = 0$) da Fig. 2.5.	34
2.7	Análise de populações mostrando os estados que têm papel na formação da corrente da última curva ($V_G = 0, 2 E_H/e$) da Fig. 2.5.	35
2.8	Influência do campo magnético nas propriedades de transporte de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 150 \text{ \AA}$ a temperatura constante.	37
2.9	Influência do campo magnético nas propriedades de transporte de um PQ esférico de GaAs com raio $R_0 = 90 \text{ \AA}$ a temperatura constante.	38
2.10	Influência da voltagem <i>gate</i> na corrente de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 500 \text{ \AA}$, na presença de um campo magnético $B_0 = 1 T$	39
2.11	Influência do acoplamento elétron-fônon em uma ilha de GaAs unidimensional com comprimento $L_C = 15 a_B$	42

3.1	Comparação entre as bases expandidas em gaussianas usadas em nossos cálculos e as respectivas funções de Bessel esféricas exatas.	54
3.2	Energias restritas de estados fundamentais de uma ilha esférica de GaAs (InSb) populada por $N = 2, 8, \text{ e } 18$ ($N = 2, 34, \text{ e } 40$) elétrons.	55
3.3	Resultados obtidos pelo método irrestrito em uma ilha de GaAs com raio $R_0 = 100 \text{ \AA}$ na ausência de campo magnético.	57
3.4	Violação da regra de Hund induzida pelo campo magnético no PQ de GaAs com $R_0 = 100 \text{ \AA}$ da figura anterior.	59
4.1	Espectro Fock-Darwin de H_0 , sem inclusão de termos SO.	70
4.2	Espectro de energia do PQ quando apenas o termo H_{AIE}^D é adicionado a H_0	71
4.3	Espectro de energia do PQ quando apenas o termo H_R é adicionado a H_0	73
4.4	Espectro de energia do PQ quando ambos os termos AIE são adicionados a H_0	73
4.5	Espectro de energia do PQ quando apenas o termo H_D^C é adicionado a H_0	74
4.6	Espectro de energia do PQ quando apenas o termo H_D^L é adicionado a H_0	75
4.7	Espectro de energia do PQ quando ambos os termos AIB são adicionados a H_0	76
4.8	Espectro de energia do PQ quando todos os termos SO possíveis são simultaneamente adicionados a H_0	77
4.9	Espectro de energia do PQ quando todos os termos SO possíveis são simultaneamente adicionados a H_0 e a largura z_0 é dobrada.	79
4.10	Cancelamento dos <i>splittings</i> de energia a campo nulo no espectro de energia do PQ quando todos os termos SO possíveis são simultaneamente adicionados a H_0 e a intensidade do campo interfacial dV/dz é quadruplicada.	81
4.11	<i>Splittings</i> de energia a campo nulo, campo magnético crítico e mini-gaps de energia como função do raio do PQ.	82
4.12	<i>Splittings</i> de energia a campo nulo, campo magnético crítico e mini-gaps de energia como função da altura do PQ.	83
4.13	Espectro de um PQ com 2 partículas interagentes na ausência de efeitos <i>spin</i> -órbita.	86
4.14	Espectro de um PQ com 2 partículas interagentes na presença de todos os termos <i>spin</i> -órbita.	88
4.15	Anticruzamentos de menor energia no espectro do PQ interagente sob ambos os efeitos <i>spin</i> -órbita AIE e AIB.	89

Lista de Tabelas

II.1	Contribuição Coulombiana para os estados de menor energia de um PQ esférico populado por até 3 elétrons. A energia de um dado estado é a soma das contribuições não nulas direta e de troca em sua respectiva linha.	22
II.2	Valores das integrais radiais que constituem as contribuições direta e de troca da tabela anterior.	23
II.3	Parâmetros usados em nossos cálculos para um PQ esférico de GaAs e InSb. . .	24
II.4	Os treze estados de menor energia de uma ilha unidimensional populada por até 4 elétrons. Também indicados estão o spin total e a energia de cada um dos estados.	41
III.1	Valores dos 5 coeficientes e expoentes que otimizam as gaussianas com as quais os 6 orbitais da Fig. 3.1 foram calculados.	55
IV.1	Todos os termos constituintes da Eq. 4.16 que definem a contribuição cúbica para o acoplamento SO do tipo Dresselhaus.	65
IV.2	Parâmetros para o PQ de InSb usados em nossos cálculos. A maneira com que as energias SO foram estimadas está explicada no texto.	69

Capítulo I

Introdução

A influência do confinamento espacial nas propriedades físicas - como espectros eletrônicos - de sistemas quânticos é um tópico de interesse bastante atual. Dentre os diversos tipos de sistemas confinados podemos destacar gases de elétrons de baixa dimensionalidade e átomos de impureza em estruturas metálicas ou semicondutoras mesoscópicas ([1]), assim como átomos e moléculas aprisionados em cavidades microscópicas ([1], [2]), onde a influência do confinamento se torna importante quando o tamanho dos átomos ou moléculas for da mesma magnitude que o tamanho da cavidade. No entanto, vale ressaltar que o espectro energético de tais sistemas não é determinado apenas pelo confinamento espacial e sua forma geométrica, sendo também influenciado por fatores do ambiente (campos elétricos, etc.) em que estão definidos, e por efeitos de muitos corpos como interação elétron-elétron, que podem inclusive ser mais importantes do que o próprio confinamento; de qualquer forma, para uma correta descrição das propriedades físicas do problema, a função de onda do sistema deve refletir, de alguma maneira, a presença do confinamento e das condições de contorno apropriadas. Devemos também deixar claro que há vários outros tipos de sistemas confinados de interesse, por exemplo, formados por fônons ([3]), plasmons ([4]) e gases de bósons confinados ([5]). Gases de elétrons de baixa dimensionalidade são definidos em estruturas semicondutoras quando a simetria de translação *bulk* é quebrada em uma ou mais dimensões espaciais, dando origem a gases de elétrons 2D (poços quânticos), 1D (fios quânticos) ou 0D (pontos quânticos); nesses sistemas os portadores perdem, para algumas regiões de energia, a característica de serem delocalizados nas três dimensões espaciais e se tornam confinados em regiões de tamanho mesoscópico na estrutura, o que faz com que suas bandas de energia contínuas se quebrem em sistemas de sub-bandas ou mesmo em estados

discretizados individuais, como ocorre em pontos quânticos, que constituem o tipo de sistema confinado abordado nessa tese.

1.1 Considerações gerais

Os objetivos principais da presente tese são o estudo das propriedades eletrônicas e de transporte de pontos quânticos (PQ's) semicondutores populadas por mais do que 1 elétron. Para o estudo de tais propriedades, focamos principalmente nas influências da interação Coulombiana entre as partículas constituintes da ilha, de um campo magnético externo aplicado ao sistema, e das diferentes formas de interação *spin*-órbita (SO) possíveis nessas estruturas.

Consideramos três tipos de geometrias confinantes caracterizando o PQ: um potencial esférico definindo um confinamento tridimensional, o qual fornece uma apropriada descrição de PQ's realizados em matrizes vítreas, quando o material externo à ilha pode ser considerado como um isolante; um potencial parabólico definindo um confinamento bidimensional, o qual é apropriado para a descrição de PQ's litograficamente formados no plano de um gás de elétrons em 2 dimensões (GE2D); e um confinamento unidimensional, formando um PQ resultante da aplicação de um potencial adicional no plano do GE2D.

Abordamos propriedades de transporte apenas no Capítulo 2, onde os confinamentos 3D e 1D são considerados, com especial ênfase nas regiões de corrente negativa (RCN's) observadas na corrente, enquanto propriedades espectrais são tratadas em todos os capítulos; no Capítulo 2 usamos o acoplamento **LS** para a obtenção dos estados de muitos elétrons da ilha, no Capítulo 3 fazemos uso dos métodos Hartree-Fock autoconsistentes Restrito (HFR) e Irrestrito (HFI) para o trato de ilhas mais densamente populadas, e no Capítulo 4, relativo ao confinamento 2D, damos especial ênfase aos anticruzamentos (AC's) de níveis de energia causados no espectro Fock-Darwin (FD) pela influência de mecanismos SO relacionados tanto à assimetria de inversão *bulk* (AIB) como à assimetria de inversão estrutural (AIE) presentes nesses sistemas. Consideramos basicamente 2 tipos possíveis de materiais constituintes do PQ, ambos do grupo III-V com estrutura cristalina zinblende, sendo eles Arseneto de Gálio (GaAs, *gap* largo) e Antimoneto de Índio (InSb, *gap* estreito).

As abreviaturas contidas nesse trabalho foram introduzidas nos parênteses dessa seção; optamos em manter aqui os termos *flip*, *gate*, *bulk*, *spin*, *gauge*, *splitting*, *gap*, *zoom*, *inset*,

up, *down*, e *plateau* como usados em seus idiomas originais. A bibliografia básica usada nesse trabalho está exposta nas 3 próximas seções.

1.2 Motivações para o estudo do transporte eletrônico

Propriedades de transporte em nanoestruturas, dentre elas pontos quânticos (aos quais também nos referiremos como ilhas), têm despertado já há mais de uma década um enorme interesse ([6], [7], [8], [9], [10]), principalmente, devido ao fato de se poder manipular de forma controlada a ocupação dos portadores de carga de tais estruturas através da aplicação de voltagens externas, e também devido ao fato de os espectros de energia de tais estruturas serem quantizados à semelhança com um átomo real. Esses sistemas são construídos de forma que uma pequena região da amostra seja espacialmente confinada em todas as dimensões espaciais, embora conectada ao restante do material por meio de barreiras de tunelamento ressonante eletrostaticamente definidas, as quais permitem a passagem de corrente eletrônica através do sistema quando uma diferença de potencial é nele aplicada. Um elétron é adicionado ou subtraído do PQ apenas quando essa diferença de potencial entrar em ressonância com um dos níveis discretizados da ilha, conforme ilustrado na Fig. 1.1.

O confinamento espacial, e a conseqüente discretização do espectro de energia, exercem marcante influência nas propriedades de transporte de PQ's ([11], [12], [13], [14], [15]). Em uma ilha metálica, cuja densidade eletrônica em geral é maior do que em uma ilha semicondutora, o espectro de energia pode ser tratado como contínuo e sua separação média entre níveis de partícula única, ΔE_m , é quase desprezível; já em uma ilha semicondutora, ΔE_m se torna um parâmetro crucial no estudo de suas propriedades de transporte. Em um PQ metálico o chamado modelo de carregamento ([16], [17], [18], [19]), que reduz a interação elétron-elétron na ilha a uma constante proporcional ao seu número de elétrons, é capaz de reproduzir razoavelmente bem os resultados experimentais. Entretanto, para se obter uma descrição mais realista dos auto-estados de N -partículas em PQ's semicondutores, que são o foco desse trabalho, sua relativamente baixa densidade eletrônica torna imperativo considerar a interação elétron-elétron a partir de um ponto de vista microscópico. A interação Coulombiana é calculada em uma forma apropriada para cada geometria aqui considerada; apenas no caso do confinamento 1D empregamos cálculos já conhecidos, baseados no chamado modelo de elétrons

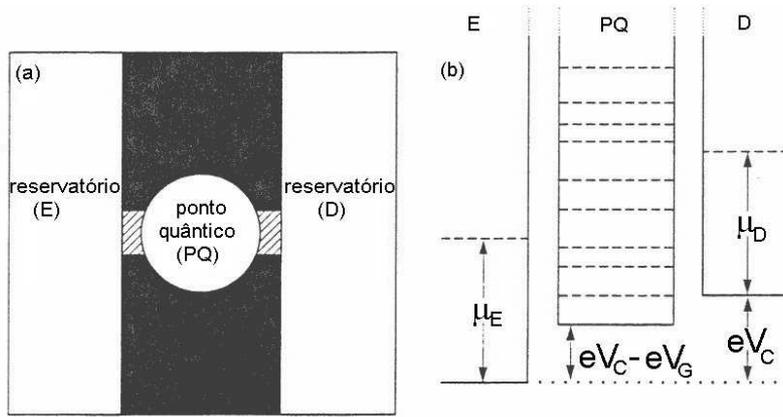


Figura 1.1: (a) Representação geométrica esquemática do sistema abordado nesta tese, consistindo de uma região confinada - ponto quântico - fracamente acoplada a dois reservatórios - canais - eletrônicos via barreiras de tunelamento (porções sombreadas); o potencial confinando o ponto quântico é geral. (b) Perfil da energia potencial eletrostática (curva sólida) ao longo de uma linha através das barreiras de tunelamento; os potenciais químicos dos reservatórios esquerdo, μ_E , e direito, μ_D , assim como os níveis de energia discretizados do PQ, são indicados (linhas tracejadas). A voltagem aplicada ao *gate*, V_G , controla a energia dos níveis do PQ, enquanto a voltagem aplicada aos canais, V_C , permite que um elétron tunele do PQ para os canais (e vice-versa) sempre que um dos potenciais químicos emparelhar com algum dos níveis do PQ (figura adaptada da Ref. [31]).

correlacionados ([20], [21], [22], [23], [24]).

Além da separação média entre níveis ΔE_m , as outras escalas de energia que definem o transporte nesses sistemas confinados são a energia das flutuações térmicas, $E_T = k_B T$, e a energia de carregamento, $E_{car} = e^2/C(N)$, que representa o custo energético para se adicionar um elétron extra ao PQ, onde $C(N)$ é a capacitância da ilha. Em ilhas metálicas, quando $E_{car} \gg E_T$, é a quantização de carga que domina suas propriedades de transporte, dando margem a efeitos como bloqueios de Coulomb e oscilações por tunelamento de 1 elétron, visíveis como *plateaus* na corrente ou picos na condutância do sistema; no caso oposto, quando $E_{car} \ll E_T$, as flutuações térmicas são capazes de destruir tais efeitos. Em ilhas semicondutoras, a razão $E_{car}/\Delta E$ define uma competição entre quantizações de carga e energia cujo efeito é o surgimento de uma estrutura fina adicional tanto nos *plateaus* como nos picos das curvas de transporte; regiões de corrente negativa, por exemplo, são uma manifestação de tal fato. No regime não-linear ([25]) considerado aqui, transições eletrônicas não apenas entre estados fundamentais, mas também envolvendo estados excitados contribuem para o transporte no sistema. Vale ressaltar que as taxas de tunelamento eletrônico através do PQ são fortemente influenciadas

pela correlação eletrônica presente nos estados de muitas partículas da ilha, a qual pode levar à supressão de alguns dos canais de tunelamento envolvendo estados excitados do sistema ([26], [27]).

Neste estudo assumimos que o tunelamento eletrônico através das barreiras seja seqüencial, que o movimento dos portadores de carga na ilha seja coerente ([28]), e que o transporte se dê em regime balístico ([29]); em tal regime, o caminho livre médio eletrônico (distância em que o elétron se move sem sofrer espalhamento) é maior do que o tamanho da ilha. Com isso, estamos assumindo que o tempo de coerência de fase eletrônica é muito maior do que o tempo que um elétron leva para cruzar toda a extensão do PQ e, assim, a coerência de fase dos auto-estados do sistema é preservada entre, por exemplo, processos de espalhamento elétron-fônon ([30]).

Como nota, uma ampla revisão de propriedades de transporte em PQ's pode ser encontrada na Ref. [31].

1.3 Motivações para o estudo do espectro eletrônico

Efeitos de muitos corpos nas propriedades eletrônicas de pontos quânticos têm também recebido enorme atenção já há mais de uma década, tanto por suas influências nas propriedades de transporte, mencionadas na seção anterior, como também nas propriedades óticas de sistemas confinados, não abordadas neste trabalho. Em um regime de forte confinamento ou de alta densidade, a interação elétron-elétron pode ser tratada como uma perturbação ao problema de partícula isolada; em um caso mais geral, todavia, uma diagonalização numérica exata deve ser realizada para a correta obtenção dos auto-estados da ilha. Há inclusive a possibilidade de formação de uma molécula de Wigner no PQ ([32], [33]) quando sua densidade eletrônica for relativamente baixa.

Várias abordagens têm sido usadas para a obtenção dos auto-estados de muitas partículas em um PQ, dentre elas, o modelo de carregamento ([16]), o modelo de elétrons correlacionados ([34]), funções de Green ([35]), métodos numéricos tais como o algoritmo de Lanczos ([21]), método de Monte Carlo ([36]), cálculos Hartree-Fock ([37], [38], [39], [40]), e teoria do funcional densidade ([41]). Vale ressaltar que também a simetria espacial, ditada pela forma do confinamento geométrico da região de localização dos portadores de carga, é um ingrediente muito importante na determinação de quaisquer efeitos quânticos na estrutura eletrônica do PQ; ela é

responsável, como veremos, pelo ordenamento dos auto-estados de partícula única no espectro do sistema.

Em um PQ tridimensional definido por um confinamento com simetria esférica, ambos os momentos angulares orbital l e de *spin* s são bons números quânticos, e os estados de muitas partículas podem ser rotulados de acordo com o esquema de acoplamento **LS** atômico usual. Tal acoplamento é capaz, como veremos no Capítulo 2, de impor regras de seleção espacial e de *spin* para as transições eletrônicas no PQ, e como consequência, ele também influencia a corrente no sistema. O efeito do *spin* total S é um tópico já bastante abordado ([42], [43], [44]); porém, o estudo da simetria espacial - em que informação pode ser obtida, nesse caso 3D, a partir do momento angular orbital total L - e de efeitos de confinamento na presença de um campo magnético externo, assim como de suas influências na corrente de tunelamento, pode fornecer mais detalhes, por exemplo, acerca dos mecanismos que dão origem às RCN's. Assim, experimentos de magneto-transporte podem fornecer uma melhor compreensão da influência da geometria confinante em um PQ de muitos elétrons, não apenas em 3D; outras geometrias podem ser consideradas como, por exemplo, ilhas bidimensionais quadradas ([44], [45], [46], [47]). No entanto, para lidar com PQ's mais densamente povoados, o acoplamento analítico **LS** deixa de ser factível e então usamos, no Capítulo 3, duas abordagens numéricas matriciais para lidar com o espectro dessas ilhas. Com elas, calcularemos o espectro de adição do sistema, e verificaremos como um campo magnético é capaz de violar a regra de Hund. Alguns tópicos abordados no trato de ilhas 3D têm sido, por exemplo, a formação de camadas de energia em seu espectro ([48]), o controle das correlações eletrônicas na ilha ([49]), a formação de moléculas de Wigner ([50]), e a influência da interação Coulombiana em seu espectro ([51], [52]).

Pontos quânticos bidimensionais definidos por um confinamento parabólico no plano de um GE2D são, talvez, os sistemas mais abordados pelo fato de possuírem uma solução analítica para o espectro de partícula única mesmo na presença de um campo magnético (o chamado espectro Fock-Darwin ([53], [54], [55])), assim como pelo fato de serem mais apropriados para realizações experimentais ([56], [57], [58], [59]). Nessa geometria cilíndrica, apenas as projeções de l e L , rotuladas como m_l e M_L , são bons números quânticos, como veremos no Capítulo 4; as respectivas projeções de s e S são rotuladas como m_s e M_S . Dentre os diversos tópicos de interesse no espectro desses PQ's, vale enfatizar os estudos de espectros de 2 elétrons interagentes em campos magnéticos ([60], [61]), de oscilações singlete-triplete no *spin* do estado

fundamental como função do campo magnético ([62], [63]), do efeito Zeeman ([64]), e de efeitos de correlação Coulombiana ([65]). Estaremos aqui mais interessados nos efeitos da interação *spin-órbita* no espectro interagente e não-interagente desses PQ's.

Já um PQ unidimensional ([21], [24], [32], [43], [66]) definido por um confinamento adicional no plano do GE2D, a ser tratado brevemente no fim do Capítulo 2, será usado apenas para compararmos a influência de diferentes geometrias tanto nas propriedades eletrônicas como nas de transporte dessas nanoestruturas.

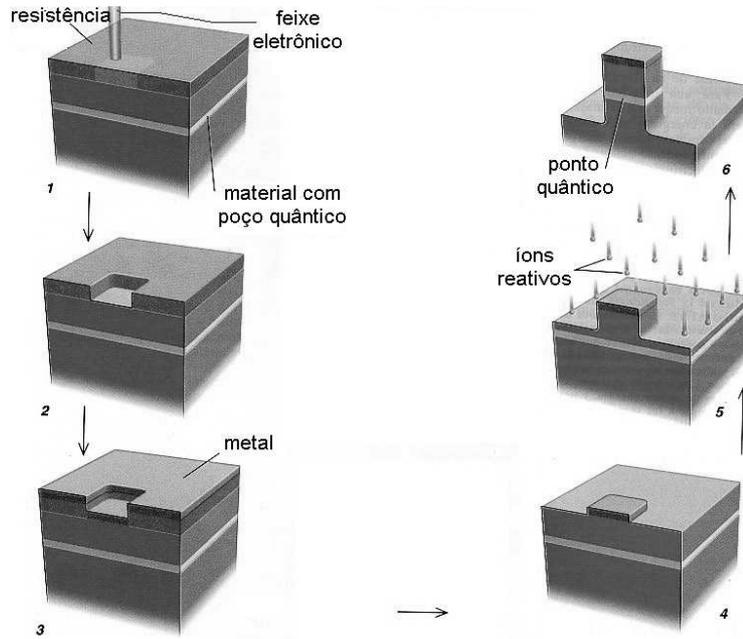


Figura 1.2: Processo de fabricação de um PQ 2D vertical através de uma série de passos de *masking* e *etching*. Primeiro, um feixe eletrônico varre a superfície de um semiconductor revestido por uma fina camada de polímero (resistência) e contendo uma camada interna de material com poço quântico (1). Resistência é removida onde o feixe desenhou um padrão (2). Uma camada metálica é depositada sobre a superfície resultante (3), e então um solvente remove a resistência restante, deixando metal apenas onde o feixe eletrônico expôs a resistência (4). Íons reativos consomem o material exceto onde ele se encontra protegido pelo metal (5), de onde resulta um PQ 2D (6) (figura adaptada da Ref. [9]).

A Fig. 1.2 descreve o método de fabricação de um PQ 2D vertical via processos litográficos; sua geometria é definida por meio do padrão desenhado pelo feixe eletrônico, e a intensidade do confinamento quântico nesse método é fixa. No pilar resultante, acima e abaixo do material com poço quântico, encontram-se camadas isolantes ultra-finas (barreiras de tunelamento) seguidas por contatos condutivos. Os isolantes confinam elétrons no poço por um longo tempo,

mas eventualmente elétrons podem tunelar quanticamente para dentro ou para fora do poço, transportando uma pequena corrente que serve para sondar seus estados de energia. Quando a diferença de potencial entre os contatos coincidir com a energia de um desses estados ressonantes, o fluxo de corrente aumenta. Se o diâmetro do pilar for consideravelmente pequeno, sua curva corrente-voltagem apresenta as características que definem o confinamento quântico (como plateaus na corrente e picos na condutância, abordados no Capítulo 2). Outro método de fabricação, que forma um PQ 2D lateral, consiste em se depositar um padrão de eletrodos acima de um material contendo uma camada interna com poço quântico (como aquele da parte (1) dessa mesma figura, com a resistência ausente e os eletrodos sendo depositados em seu lugar); quando uma voltagem é aplicada aos eletrodos, o campo resultante expelle os elétrons dessa camada e os comprime em pequenas regiões; a intensidade do confinamento quântico nessas regiões é manipulada pela variação da voltagem nos eletrodos.

Como nota, uma ampla revisão de propriedades eletrônicas em PQ's pode ser encontrada na Ref. [67].

1.4 Motivações para o estudo da interação *spin-órbita*

Em materiais com estrutura zinblende, a ausência implícita de simetria de inversão *bulk* induz um acoplamento SO nos elétrons do sistema ([68]), rotulado como assimetria de inversão *bulk* ou termo Dresselhaus, e que é cúbico no momento eletrônico \mathbf{p} . Se um confinamento é aplicado a essa estrutura, de forma a se realizar um GE2D no plano perpendicular ao confinamento, o sistema bidimensional resultante também perde a simetria de inversão estrutural, resultando em outro tipo de acoplamento SO para os elétrons do material ([69]), rotulado como assimetria de inversão estrutural ou termo Rashba, o qual é linear em \mathbf{p} . Sob tal confinamento, o mecanismo AIB ganha duas novas contribuições por causa da quantização definindo o gás de elétrons, sendo uma quadrática e outra linear em \mathbf{p} . Se ainda um outro confinamento lateral é aplicado ao GE2D, de maneira a nele formar um PQ, o mecanismo AIE também ganha duas novas contribuições, sendo uma linear e outra independente de \mathbf{p} . No entanto, dessas 6 contribuições SO possíveis no PQ assim formado, apenas 4 são efetivas como veremos no Capítulo 4.

A criação e manipulação de *spins* em nanoestruturas semicondutoras ([70]) vem recentemente recebendo crescente atenção, principalmente depois da proposta de Datta-Das ([71]) de

um transistor de efeito de campo baseado em *spin*, cujo funcionamento é fundamentado em um acoplamento SO do tipo Rashba dos elétrons no GE2D, e que praticamente deu origem à pesquisa em spintrônica ([72], [73], [74]), onde não apenas a carga mas também o *spin* do elétron é capaz de transportar informação; recentemente, a inclusão do acoplamento SO do tipo Dresselhaus nesse dispositivo de Datta-Das foi proposta como uma alternativa à idéia original ([84]). Outra causa desse recente interesse é a possibilidade de se construir dispositivos de computação quântica, cujo funcionamento é baseado em uma superposição coerente dos estados quânticos de um sistema de 2 níveis, usando-se, por exemplo, pontos quânticos ([75], [76], [77]). Por esses motivos, uma melhor compreensão dos mecanismos de relaxação de *spin* ([78], [79], [80], [81], [82]) causados, por exemplo, por acoplamentos SO, assim como das propriedades de transporte sob tais acoplamentos ([83]), é essencial. Estudos dos efeitos ligados às diferentes formas de acoplamento SO são feitos, por exemplo, nas Refs. [85] e [86] em poços quânticos, nas Refs. [87] e [88] em heteroestruturas, e na Ref. [89] em nanocristais com estrutura zinblende. Todavia, estaremos aqui interessados nos efeitos SO induzidos no espectro FD de PQ's parabólicos.

Em PQ's de materiais com largo *gap* de energia, como GaAs, tem sido usada uma transformação unitária ([90], [91], [92], [93], [94]) no Hamiltoniano SO, a qual resulta, em uma maneira perturbativa ([95]), apenas em um termo *spin*-órbita efetivo diagonal. Por isso, nenhuma mistura de níveis no espectro é observada sob tal transformação, a qual pode, de fato, ser justificável em materiais de *gap* largo onde os acoplamentos SO são pequenos. Entretanto, em materiais de *gap* estreito, como InSb, em que ambos os efeitos AIE e AIB são bem maiores ([96]), o trato do Hamiltoniano SO original é requerido. Dentre alguns dos trabalhos que têm lidado com nanoestruturas de *gap* estreito, as Refs. [97], [98] e [99] abordam propriedades espectroscópicas, propriedades magneto-ópticas e efeitos de não-parabolicidade da banda de condução em PQ's de InSb, respectivamente. De maior interesse para nosso estudo são as Refs. [100] e [101], que lidam com efeitos SO no espectro de PQ's de InSb. A primeira usa uma versão linear da teoria **kp** e leva em conta os termos AIE oriundos dos confinamentos perpendicular e lateral, com claros AC's de níveis presentes em seu espectro; já a segunda considera apenas o termo AIE relativo ao confinamento lateral, e nenhum AC de níveis de energia é observado. Mostraremos nesse trabalho quais termos SO são capazes de provocar AC's no espectro em dados campos magnéticos críticos, onde uma forte mistura de *spins* e conseqüentemente intensos processos de relaxação *spin-flip* são presentes.

1.5 Escopo da tese

No Capítulo 2 consideramos um PQ tridimensional com até 3 elétrons definido por um potencial esférico. As energias são analiticamente calculadas no acoplamento **LS**, com a interação Coulombiana sendo tratada como perturbação, em uma abordagem Hartree-Fock. Efeitos de um campo magnético, sem levar em conta o termo diamagnético, são considerados. A corrente eletrônica é calculada levando-se em conta as regras de seleção em S e em L . No final desse capítulo, tratamos um PQ unidimensional com até 4 elétrons definido por um potencial quadrado, em que emprega-se um espectro já conhecido e a corrente é também calculada.

No Capítulo 3 abordamos o mesmo sistema do capítulo anterior, só que de uma maneira numérica que possibilita o trato de ilhas mais populadas; consideramos que o PQ seja populado por até 40 elétrons interagentes. Os formalismos usados são os de Roothaan e Pople-Nesbet, respectivamente apropriados para sistemas de camada fechada e aberta. A base usada é expandida em gaussianas otimizadas, e a energia de adição do sistema, assim como a validade da regra de Hund, são analisadas.

No Capítulo 4 consideramos um PQ bidimensional com 2 elétrons interagentes definido por um potencial parabólico. Além do campo magnético, uma detalhada análise de todas as possíveis formas de interação *spin*-órbita no sistema é feita, mostrando suas regras de seleção e seus efeitos no espectro Fock-Darwin usual como, por exemplo, a indução de diversos anticruzamentos de níveis onde intensos mecanismos *spin-flip* ocorrem.

No Capítulo 5 tecemos as conclusões finais relativas a cada simetria, além de expormos as perspectivas futuras do trabalho contido nesta tese.

Capítulo II

Mecanismos de bloqueio nas propriedades de transporte de um ponto quântico esférico

Abordamos nesse capítulo propriedades eletrônicas e de transporte de pontos quânticos esféricos de GaAs e InSb carregados com 3 elétrons. Consideramos campos magnéticos fracos o suficiente para que o termo diamagnético seja desprezível, e tratamos a interação elétron-elétron via formalismo Hartree-Fock, em um sentido perturbativo. Os auto-estados são obtidos pelo esquema de acoplamento **LS**, e especial ênfase é dada tanto no ordenamento de níveis de energia produzido por essa simetria, como principalmente na maneira em que esse ordenamento influi na corrente eletrônica do sistema através de regras de seleção explícitas para L e S as quais, por sua vez, definem dois mecanismos de bloqueio para a corrente. No fim do capítulo fazemos uma breve comparação entre esse PQ esférico e uma ilha unidimensional.

2.1 Hamiltoniano geral

O Hamiltoniano geral, assim como o formalismo usado para a obtenção das propriedades de transporte eletrônico de PQ's é derivado da Ref. [34], em que o PQ é definido como um sistema formado por dois canais eletrônicos que são conectados à ilha através de fracas barreiras de tunelamento. O Hamiltoniano geral H do sistema pode ser separado como $H = H_0 + H_P$, em que o termo não perturbado, $H_0 = H_{PQ} + H_F + H_D + H_E$, inclui os Hamiltonianos do ponto

quântico isolado H_{PQ} , de um banho térmico fonônico H_F , e do canal esquerdo (direito) de elétrons livres H_E (H_D).

As contribuições presentes em H_0 são escritas como

$$\begin{aligned}
H_{E(D)} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}^{E(D)} c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma} , \\
H_F &= \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\mathbf{q}} \left(a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) , \\
H_{PQ} &= \sum_{\alpha, \sigma} (\varepsilon_{\alpha} - eV_G) c_{\alpha, \sigma}^{\dagger} c_{\alpha, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4 \\ \sigma_1, \sigma_2}} \langle \alpha_1, \alpha_2 | V_{ee} | \alpha_3, \alpha_4 \rangle c_{\alpha_1, \sigma_1}^{\dagger} c_{\alpha_2, \sigma_2}^{\dagger} c_{\alpha_3, \sigma_2} c_{\alpha_4, \sigma_1} ,
\end{aligned} \tag{2.1}$$

onde $c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma}^{\dagger}$ ($c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma}$), $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ ($a_{\mathbf{q}}$), e $c_{\alpha, \sigma}^{\dagger}$ ($c_{\alpha, \sigma}$) são, respectivamente, operadores de criação (destruição) para um elétron livre no canal esquerdo (direito) com energia $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{E(D)}$ e vetor de onda \mathbf{k} , um fônon na ilha com energia $\hbar \omega_{\mathbf{q}}$ e vetor de onda \mathbf{q} , e um elétron no estado discretizado α do PQ com energia ε_{α} ; ainda, σ é o componente z do *spin* eletrônico, V_G é a voltagem *gate* aplicada ao sistema, e $\langle \alpha_1, \alpha_2 | V_{ee} | \alpha_3, \alpha_4 \rangle$ é a energia da interação elétron-elétron V_{ee} dentro da ilha.

Já o termo tratado como perturbação, $H_P = H_E^T + H_D^T + H_{EF}$, leva em conta processos de tunelamento eletrônico H_E^T (H_D^T) entre a ilha e o canal esquerdo (direito), além de processos de relaxação elétron-fônon H_{EF} ocorrendo dentro da ilha; suas contribuições são escritas como

$$\begin{aligned}
H_{E(D)}^T &= \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} \left[T_{\mathbf{k}, \alpha}^{E(D)} c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\alpha, \sigma} + T_{\mathbf{k}, \alpha}^{E(D)*} c_{\alpha, \sigma}^{\dagger} c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma} \right] , \\
H_{EF} &= \sum_{\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2, \sigma} \sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} c_{\alpha_1, \sigma}^{\dagger} c_{\alpha_2, \sigma} (a_{\mathbf{q}} + a_{\mathbf{q}}^{\dagger}) ,
\end{aligned} \tag{2.2}$$

em que $T_{\mathbf{k}, \alpha}^{E(D)}$ é a amplitude de tunelamento eletrônico entre o PQ e o canal esquerdo (direito) e $\sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)}$ representa o acoplamento elétron-fônon na ilha. É de se notar que o primeiro (segundo) termo em $H_{E(D)}^T$ é responsável por diminuir (aumentar) o número de elétrons N no PQ, enquanto que o primeiro (segundo) termo em H_{EF} representa uma transição entre dois estados da ilha envolvendo absorção (emissão) de um fônon, sem mudança de N .

A corrente de tunelamento eletrônico através do sistema, seguindo também as Refs. [16] e [17], é dada por

$$I^{E(D)} = \mp e \sum_{i, j (j \neq i)} \bar{P}_j \left(\Gamma_{i, j}^{E(D)-} - \Gamma_{i, j}^{E(D)+} \right) , \tag{2.3}$$

onde $\Gamma_{i,j}^{E(D)}$ é a taxa de transição efetiva relativa ao acoplamento ilha-canal esquerdo (direito), e \bar{P}_i é a solução estacionária ($dP_i/dt = 0$) da equação mestre regendo a evolução temporal da probabilidade de ocupação, P_i , de um dado auto-estado i de H_0 ,

$$\frac{d}{dt}P_i = \sum_{j(j \neq i)} (\Gamma_{i,j}P_j - \Gamma_{j,i}P_i) . \quad (2.4)$$

A Eq. 2.3 leva em conta o balanço entre elétrons que entram (+) e saem (−) do PQ por unidade de tempo, e na Eq 2.4 uma restrição relativa à normalização dos auto-estados, $\sum_i P_i = 1$, é assumida, além de $\Gamma_{i,j}$ representar a taxa de transição efetiva total do sistema (ilha-canal mais relaxação elétron-fônon), discutida na próxima seção e detalhada no Apêndice A.

2.2 Taxas de transição

No limite de fraco acoplamento aqui assumido e descrito por H_P , as taxas de transição $\gamma_{j,i}$ possíveis no sistema são obtidas pelo uso da Regra de Ouro de Fermi ([102]),

$$\gamma_{j,i} = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) \left| \langle \Psi_j^{(0)} | H_P | \Psi_i^{(0)} \rangle \right|^2 \delta(E_j^{(0)} - E_i^{(0)}) , \quad (2.5)$$

onde $E_i^{(0)}$ ($E_j^{(0)}$) e $\Psi_i^{(0)}$ ($\Psi_j^{(0)}$) são, respectivamente, a energia e a função de onda do estado inicial (final) de H_0 . Cada um de seus auto-estados é decomposto como $|\Psi^{(0)}\rangle = |\Psi_{PQ}\rangle \otimes |\Psi_E\rangle \otimes |\Psi_D\rangle \otimes |\Psi_F\rangle$, com autovalor $E^{(0)} = E_{PQ} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^E + \varepsilon_{\mathbf{k}}^D + \hbar\omega_{\mathbf{q}}$, em que E_{PQ} representa o espectro de N -partículas da ilha; sua obtenção depende tanto da geometria confinante do PQ como do modelo usado para seu cálculo, conforme discutido na próxima seção. Já as taxas de transição efetivas entre estados da ilha são obtidas ao somarmos sobre os estados finais dos canais e de fônons, ou seja,

$$\Gamma_{PQ_j, PQ_i} = \left\langle \sum_{E_j, D_j, F_j} \gamma_{j,i} \right\rangle_{term(E_i, D_i, F_i)} , \quad (2.6)$$

em que cada elemento matricial $\gamma_{j,i}$ é calculado sob condição de equilíbrio térmico inicial; em nossos cálculos assumimos que as constantes de acoplamento em H_P não dependam dos estados envolvidos na transição, definindo assim $T_{\mathbf{k},\alpha}^{E(D)} \equiv T^{E(D)}$ e $\sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} \equiv \sqrt{g}$.

Com essas considerações, as transições permitidas fornecidas pela Eq. 2.6 são obtidas como

$$\Gamma_{PQ_i, PQ_j}^{E(D)-} = \frac{1}{2} t^{E(D)} [1 - f_{E(D)}(E)] B_{PQ_i, PQ_j} \delta_{N_i, N_j - 1} , \quad (2.7)$$

$$\Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{E(D)+} = \frac{1}{2} t^{E(D)} [f_{E(D)}(E)] C_{PQ_j, PQ_i} \delta_{N_j, N_i + 1} , \quad (2.8)$$

$$\Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{F-} = r [n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}})] D_{PQ_j, PQ_i} \delta_{N_j, N_i} , \quad (2.9)$$

$$\Gamma_{PQ_i, PQ_j}^{F+} = r [1 + n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}})] D_{PQ_i, PQ_j} \delta_{N_i, N_j} ; \quad (2.10)$$

uma descrição detalhada de como essas taxas são obtidas é exposta no Apêndice A. As duas primeiras expressões (que entram na Eq. 2.3) controlam a diminuição ($\Gamma^{E(D)-}$) ou o aumento ($\Gamma^{E(D)+}$) do número de elétrons no PQ através do canal esquerdo (direito), enquanto as duas últimas controlam o espalhamento eletrônico na ilha devido à absorção (Γ^{F-}) ou à emissão (Γ^{F+}) de um fônon. Nestas quatro equações, $n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}})$ e $f_{E(D)}(E)$ são, respectivamente, as distribuições de Bose-Einstein e Fermi-Dirac, essa última calculada em $E = E_{PQ_j} - E_{PQ_i}$ e envolvendo o potencial químico $\mu_{E(D)}$ do canal esquerdo (direito); nessas equações também estão definidos os termos que em nossos cálculos parametrizam os processos de tunelamento ilha-canal esquerdo (direito), $t^{E(D)}$, e de relaxação na ilha, r , como

$$t^{E(D)} = \frac{2\pi}{\hbar} |T^{E(D)}|^2 \rho_{E(D)}(E) , \quad (2.11)$$

$$r = \frac{2\pi}{\hbar} g \rho_F(\hbar\omega_{\mathbf{q}}) , \quad (2.12)$$

onde $\rho_{E(D)}(E)$ e $\rho_F(\hbar\omega_{\mathbf{q}})$ são, respectivamente, a densidade de estados eletrônicos no canal esquerdo (direito) e de fonons na ilha. Por fim, nas Eqs. 2.7-2.10,

$$B_{PQ_i, PQ_j} = \left| \sum_{\alpha, \sigma} \langle \Psi_{PQ_i} | c_{\alpha, \sigma} | \Psi_{PQ_j} \rangle \right|^2 , \quad (2.13)$$

$$C_{PQ_j, PQ_i} = \left| \sum_{\alpha, \sigma} \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha, \sigma}^+ | \Psi_{PQ_i} \rangle \right|^2 , \quad (2.14)$$

$$D_{PQ_j, PQ_i} = \left| \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \sigma} \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha_1, \sigma}^+ c_{\alpha_2, \sigma} | \Psi_{PQ_i} \rangle \right|^2 = D_{PQ_i, PQ_j} , \quad (2.15)$$

são os elementos matriciais entre os estados de N -partículas do PQ que determinam as regras de seleção para os respectivos processos; tais elementos também dependem exclusiva-

mente do modelo e geometria usados para se descrever a ilha (ou seja, como os estados α são caracterizados), conforme abordado na seção seguinte. A taxa de transição efetiva total (que entra na Eq. 2.4) é então a soma de todos os termos nas Eqs. 2.7-2.10, dada como $\Gamma = \Gamma^{E+} + \Gamma^{D+} + \Gamma^{E-} + \Gamma^{D-} + \Gamma^{F+} + \Gamma^{F-}$.

2.3 Espectro Hartree-Fock de uma ilha esférica

Todo o formalismo exposto até aqui é geral; nenhuma suposição específica foi feita acerca do PQ abordado. Obviamente, a obtenção tanto do espectro da ilha como de suas taxas de transição depende do tipo e formato da ilha. No estudo abordado no presente capítulo, consideramos como potencial confinante um poço esférico infinito, o qual é mais adequado à representação de PQ's formados em matrizes vítreas, onde a característica isolante do material externo ao ponto justifica a escolha de tal potencial. Sob essa simetria, além do *spin* - $s = 1/2$, $m_s \equiv \sigma/2 = \pm 1/2$ -, o conjunto de números quânticos usuais para um átomo, n, l, m_l , é empregável e a ilha apresenta então um espectro de níveis de energia de 1-partícula, na ausência de campos externos, em forma de camadas, como em um átomo real. A diferença está na seqüência de níveis ([103]); no potencial esférico ela é $1s, 1p, 1d, 2s, 1f, \dots$, enquanto o potencial Coulombiano de um átomo real fornece a seqüência $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, \dots$. A aplicação de um campo magnético levanta as degenerescências orbital e de *spin* dos estados. A vantagem no uso de um confinamento $3D$ é que podemos estudar a influência, além do *spin* eletrônico, da geometria do confinamento espacial nas propriedades espectrais e de transporte do sistema de N -partículas, pois informação sobre tal confinamento estará embutida nos estados $\{n, l, m_l\}$, e podemos então fazer uso da álgebra de momento angular para extraí-la.

As autofunções normalizadas de 1-partícula para um PQ esférico de raio R_0 são dadas por

$$\Psi_{\alpha;\sigma}(x, \theta, \phi) \equiv \varphi_{n,l,m_l}(x, \theta, \phi) \chi_{s,m_s} = \left[\frac{2}{R_0^3} \frac{1}{[j_{l+1}(\alpha_{nl})]^2} \right]^{1/2} j_l(\alpha_{nl}x) Y_{l,m_l}(\theta, \phi) \chi_{s,m_s}, \quad (2.16)$$

onde $x = r/R_0$, $j_l(\alpha_{nl}x)$ é a função de Bessel esférica de ordem l para o n -ésimo nível, α_{nl} é seu zero, $Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$ é um harmônico esférico, e χ_{m_s} é a autofunção de *spin*.

Para o trato do problema de N -partículas optamos por usar o esquema de acoplamento **LS** ([104]) (dada a ausência de interações tipo *spin*-órbita, quando o acoplamento *jj* pode então se tornar preferencial), em que os estados do PQ passam a ser rotulados de acordo

com os momentos angulares totais orbital L e de *spin* S . Cada um desses estados é uma combinação linear de determinantes de Slater envolvendo os estados de 1-partícula da Eq. 2.16 que preservem a simetria geral do estado em questão, multiplicados pelos coeficientes de Clebsch-Gordan $C_{m_1, m_2, m_3}^{j_1, j_2, j_3} = \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j_3, m_3 \rangle$ correspondentes à adição dos momentos angulares envolvidos; isso equivale a construir todos os auto-estados anti-simétricos possíveis para uma dada ocupação N da ilha. Para o caso mais simples, $N = 2$, temos

$$|LM_L, SM_S\rangle = \sum_{\substack{l_1, l_2 \\ m_{l_1}, m_{l_2}}} C_{m_{l_1}, m_{l_2}, M_L}^{l_1, l_2, L} |l_1, m_{l_1}\rangle |l_2, m_{l_2}\rangle \sum_{\substack{s_1, s_2 \\ m_{s_1}, m_{s_2}}} C_{m_{s_1}, m_{s_2}, M_S}^{s_1, s_2, S} \||s_1, m_{s_1}\rangle |s_2, m_{s_2}\rangle\| , \quad (2.17)$$

ou

$$|LM_L, SM_S\rangle = \sum_{\substack{l_1, l_2 \\ m_{l_1}, m_{l_2}}} C_{m_{l_1}, m_{l_2}, M_L}^{l_1, l_2, L} \||l_1, m_{l_1}\rangle |l_2, m_{l_2}\rangle\| \sum_{\substack{s_1, s_2 \\ m_{s_1}, m_{s_2}}} C_{m_{s_1}, m_{s_2}, M_S}^{s_1, s_2, S} |s_1, m_{s_1}\rangle |s_2, m_{s_2}\rangle , \quad (2.18)$$

em que $\||j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle\|$ representa um determinante de Slater sujeito às condições $|j_1 - j_2| < J < j_1 + j_2$; em notação espectroscópica, ^{2S+1}L , o estado fundamental é um singlete 1S (configuração $1s^2$), e os primeiros estados excitados são um tripleto 3P e um singlete 1P (configuração $1s1p$).

O caso $N = 3$ é obtido analogamente ([104]), envolvendo agora uma combinação de estados de 3-partículas $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle |j_3, m_3\rangle$, ponderados por um produto de dois coeficientes de Clebsch-Gordan sujeitos às restrições $|j_1 - j_2| < J' < j_1 + j_2$ e $|J' - j_3| < J < J' + j_3$; o estado fundamental é um dubleto 2P (configuração $1s^21p$), enquanto que os primeiros estados excitados, sendo um quarteto e três dubletos, são 4P , 2D , 2S , e $^2P'$ (configuração $1s1p^2$). Como nota, o índice n_i foi omitido nas últimas considerações, pois estamos interessados nos estados de menor energia do PQ, e consideramos apenas uma baixa ocupação da ilha, $N \leq 3$; dessa forma, as combinações lineares que caracterizam um dado estado envolvem somente funções radiais com $n_i = 1$. Restringimo-nos aqui a $N \leq 3$ pois no presente capítulo estamos interessados em obter os auto-estados do PQ analiticamente, e a inclusão de um número maior de partículas se torna um tanto intrincada no acoplamento **LS**. Abordaremos ilhas com maior ocupação eletrônica no próximo capítulo, onde um cálculo Hartree-Fock autoconsistente será desenvolvido.

São nesses estados **LS** que calculamos, na aproximação Hartree-Fock ([104]), a energia E_C

Tabela II.1: Contribuição Coulombiana para os estados de menor energia de um PQ esférico populado por até 3 elétrons. A energia de um dado estado é a soma das contribuições não nulas direta e de troca em sua respectiva linha.

N	^{2S+1}L	$F^0(1s, 1s)$	$F^0(1s, 1p)$	$F^0(1p, 1p)$	$F^2(1p, 1p)$	$G^1(1s, 1p)$
2	1S	1	0	0	0	0
2	3P	1	0	0	0	$-\frac{1}{3}$
2	1P	1	0	0	0	$\frac{1}{3}$
3	2P	1	2	0	0	$-\frac{1}{3}$
3	4P	0	2	1	$-\frac{1}{5}$	$-\frac{2}{3}$
3	2D	0	2	1	$\frac{1}{25}$	$-\frac{1}{3}$
3	2S	0	2	1	$\frac{2}{5}$	$-\frac{1}{3}$
3	$^2P'$	0	2	1	$-\frac{1}{5}$	$\frac{1}{3}$

da interação Coulombiana $V_{ee}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^2/(\varepsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ presente na Eq. 2.1, onde a expansão usual em multipolos ([105])

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{\kappa=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2\kappa+1} \frac{r_{<}^{\kappa}}{r_{>}^{\kappa+1}} \sum_{m_{\kappa}=-\kappa}^{\kappa} (-1)^{m_{\kappa}} Y_{\kappa, m_{\kappa}}(\theta_1, \phi_1) Y_{\kappa, -m_{\kappa}}(\theta_2, \phi_2) \quad (2.19)$$

é empregada; nela, \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 são as coordenadas eletrônicas, ε é a constante dielétrica do PQ, e $r_{<}$ ($r_{>}$) é o menor (maior) valor entre as coordenadas radiais r_1 e r_2 . A vantagem no uso de tal expansão é que ela permite, na geometria aqui usada, um cálculo analítico para toda a parte angular do problema, deixando-nos apenas um problema radial unidimensional para resolver; esse cálculo analítico envolve duas integrações angulares, cada uma englobando um produto de três harmônicos esféricos nas coordenadas θ_i e ϕ_i ([106]), e que têm como resultado um produto de coeficientes de Clebsh-Gordan relativos aos momentos angulares envolvidos. Embora o somatório em κ seja infinito, apenas os termos satisfazendo as regras de adição de momento angular não se anulam.

As distintas contribuições da energia Coulombiana na aproximação Hartree-Fock, F^{κ} e G^{κ} , para a energia total de um dado estado ^{2S+1}L do PQ são expressas como

$$F^{\kappa}(n_1l_1, n_2l_2) = \frac{e^2}{\varepsilon R_0} \Gamma^{\kappa}(n_1l_1, n_2l_2) , \quad (2.20)$$

$$G^{\kappa}(n_1l_1, n_2l_2) = \frac{e^2}{\varepsilon R_0} \Lambda^{\kappa}(n_1l_1, n_2l_2) , \quad (2.21)$$

Tabela II.2: Valores das integrais radiais que constituem as contribuições direta e de troca da tabela anterior.

<i>integral</i>	(1s, 1s)	(1s, 1p)	(1p, 1p)
Γ^0	1,7860731	1,6196770	1,5252119
Γ^2	0	0	0,9087439
Λ^1	0	1,0789639	0

e são dadas em termos das integrais radiais adimensionais direta Γ^κ e de troca Λ^κ ,

$$\Gamma^\kappa(n_1l_1, n_2l_2) = N_1^2 \int_0^1 \int_0^1 dx_1 dx_2 x_1^2 x_2^2 \frac{x_{<}^\kappa}{x_{>^{\kappa+1}}} j_{l_1}^2(\alpha_{n_1l_1} x_1) j_{l_2}^2(\alpha_{n_2l_2} x_2), \quad (2.22)$$

$$\Lambda^\kappa(n_1l_1, n_2l_2) = N_1^2 \int_0^1 \int_0^1 dx_1 dx_2 x_1^2 x_2^2 \frac{x_{<}^\kappa}{x_{>^{\kappa+1}}} j_{l_1}(\alpha_{n_1l_1} x_1) j_{l_2}(\alpha_{n_2l_2} x_1) j_{l_1}(\alpha_{n_1l_1} x_2) j_{l_2}(\alpha_{n_2l_2} x_2), \quad (2.23)$$

onde a constante de normalização é $N_1^2 = 4(j_{l_1+1}^2(\alpha_{n_1l_1}) j_{l_2+1}^2(\alpha_{n_2l_2}))^{-1}$. Energias de Coulomb para os estados de menor energia de um PQ de simetria esférica populado por 2 e 3 elétrons são dadas na Tab. II.1, onde subentende-se que E_C de um dado estado é obtida pela soma dos termos não nulos em sua respectiva linha; a Tab. II.2 mostra os valores das integrais radiais envolvidas.

A energia total E_{PQ} de um dado auto-estado da ilha é, obviamente, a soma das contribuições Coulombianas presentes em E_C com as N contribuições de partícula única presentes em $\varepsilon_\alpha \equiv \langle \alpha | H_{(1P)} | \alpha \rangle$ na Eq. 2.1, onde o operador $H_{(1P)}$ engloba todas as contribuições de 1-partícula do sistema, sendo dado, a V_G nula, por

$$H_{(1P)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 + g \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}, \quad (2.24)$$

em que $\mu_B = e\hbar/(2m_0c)$, m (m_0) e g são, respectivamente, o magneton de Bohr, a massa eletrônica efetiva (livre) e o fator g do *bulk* do material. Tomando-se o campo magnético como $\mathbf{B} = B_0(0, 0, 1)$ e usando-se o *gauge* simétrico $\mathbf{A} = (\mathbf{B} \times \mathbf{r})/2$, $H_{(1P)}$ fica

$$H_{(1P)} = -\frac{\hbar^2}{2mR_0^2} \nabla^2 + \mu_B B_0 \left(\frac{l_z}{\tilde{m}} + g s_z \right) + \frac{e^2 B_0^2 R_0^2}{8mc^2} x^2 \text{sen}^2(\theta), \quad (2.25)$$

em que $\tilde{m} = m/m_0$ e o Laplaciano é $\nabla^2 = x^{-2}(\partial/\partial x(x^2\partial/\partial x) - \mathbf{L}^2)$. Vale ressaltar que o Hamiltoniano da ilha, $H_{PQ} = \sum_{i=1}^N H_{(1P)} + V_{ee}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, pode ser escrito em termos das unidades

Tabela II.3: Parâmetros usados em nossos cálculos para um PQ esférico de GaAs e InSb.

<i>material</i>	\tilde{m}	g	ε	a_B (Å)	E_H (meV)
<i>GaAs</i>	0,065	0,45	12,65	103	140
<i>InSb</i>	0,013	-53,1	16,5	672	21,5

efetivas de raio ($a_B = (\varepsilon/\tilde{m})a_0$, com $a_0 = \hbar^2/(m_0e^2)$) e de energia ($E_H = (2\tilde{m}/\varepsilon)E_0$, com $E_0 = e^2/(2a_0)$) do PQ, as quais são empregadas nos gráficos que se seguem; a Tab. II.3 lista os parâmetros usados em nossos cálculos, tanto para PQ's de GaAs como de InSb.

Em nossos cálculos desprezamos o último termo de $H_{(1P)}$, quadrático em B_0 . Para validar tal aproximação, estimamos os valores do campo magnético que nos permitem considerar apenas os dois termos lineares em B_0 , calculando a média da expressão $x^2 \sin^2(\theta)$ no estado fundamental do PQ ($\{n, l, m_l, m_s\} = \{1, 0, 0, \pm 1/2\}$ na Eq. 2.16); procedendo assim, encontramos as duas condições

$$B_0 < B_{m_l} = \left(\frac{36\pi^2}{2\pi^2 - 3} \right) \frac{m_l \hbar c}{R_0^2 e} \simeq 1.4 \cdot 10^6 \frac{m_l}{R_0^2},$$

$$B_0 < B_{m_s} = \left(\frac{36\pi^2}{2\pi^2 - 3} \right) \frac{m_s \hbar c}{R_0^2 e} g \tilde{m} \simeq 1.4 \cdot 10^6 \frac{m_s}{R_0^2} g \tilde{m}, \quad (2.26)$$

onde a primeira (segunda) expressão é relativa ao levantamento da degenerescência orbital (de *spin*), $\mu_B B_0 m_l / \tilde{m}$ ($\mu_B B_0 g m_s$) na Eq. 2.25, com R_0 medido em Ângstrons e B_0 medido em Teslas. Desprezando-se então o termo quadrático no campo, $H_{(1P)}$ em unidades de E_H se escreve como

$$H_{(1P)} = \frac{1}{2\varepsilon} \frac{a_B^2}{R_0^2} \left[-\frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\mathbf{L}^2}{x^2} + \frac{R_0^2}{l_B^2} (l_z + \tilde{m} g s_z) \right], \quad (2.27)$$

onde o comprimento magnético é $l_B = \sqrt{\hbar c / (e B_0)}$; nessas mesmas unidades, $V_{ee}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 1/\varepsilon(a_B/R_0)1/|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$, com $\mathbf{x} = \mathbf{r}/R_0$. Desde que o campo B_0 satisfaça então as condições da Eq. 2.26, a contribuição de partícula única para E_{PQ} é

$$E_{nlm_l m_s}^{(1P)} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\alpha_{nl}^2}{R_0^2} + \mu_B B_0 \left(\frac{m_l}{\tilde{m}} + g m_s \right), \quad (2.28)$$

que ao somarmos sobre as N partículas em uma dada configuração $n^1 l^1 n^2 l^2 \dots n^N l^N$ da ilha,

fornece-nos a contribuição total

$$E_{M_L M_S} = \frac{\hbar^2}{2mR_0^2} \sum_{nl} \alpha_{nl}^2 + \mu_B B_0 \left(\frac{M_L}{\tilde{m}} + gM_S \right), \quad (2.29)$$

a qual deve, por sua vez, ser finalmente somada à contribuição Coulombiana E_C para que assim obtenhamos a energia total de um dado auto-estado $|LM_L, SM_S\rangle$ do PQ nessa abordagem.

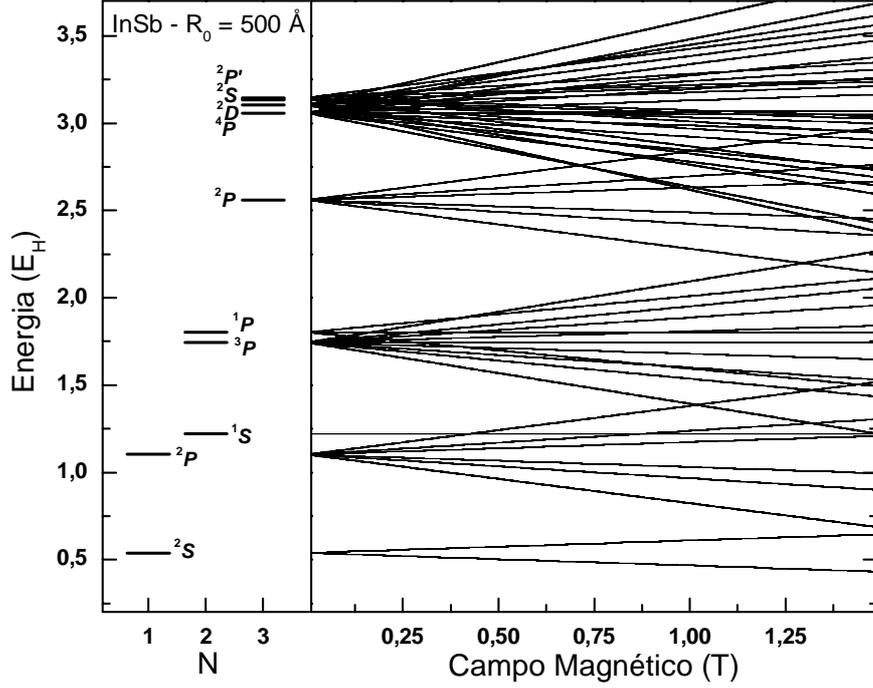


Figura 2.1: Níveis de energia para $N = 1, 2$ e 3 partículas de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 500 \text{ \AA}$. Os níveis no Painel esquerdo, medidos em unidades efetivas, são rotulados de acordo com o esquema de acoplamento **LS**, usando-se a notação espectroscópica ^{2S+1}L . No Painel direito, o campo magnético levanta as degenerescências orbital e de *spin* dos estados de N -partículas, e por causa do alto fator g desse material, cruzamentos de níveis são observados em específicos valores do campo magnético, o que provoca mudanças na seqüência de estados do PQ. Da Eq. 2.26, o campo é limitado por $B_{m_l} \simeq 5.6 \text{ T}$ e $B_{m_s} \simeq 1.9 \text{ T}$.

Mostramos nas Figs. 2.1 e 2.2, respectivamente, o espectro de energia de um PQ esférico como função do campo magnético para uma ilha de InSb e raio $R_0 = 500 \text{ \AA}$, e para uma ilha de GaAs e raio $R_0 = 90 \text{ \AA}$. Consideramos uma ocupação $N \leq 3$ e tomamos $V_G = 0$; uma voltagem finita apenas deslocaria igualmente os níveis para menores energias. Em ambos os casos temos $R_0 < a_B$, de forma que os portadores estão em um regime de forte confinamento, e a interação

elétron-elétron pode de fato ser tratada como uma perturbação à energia total da ilha. Observe que na ausência do campo, os estados fundamentais têm *spin* total $S = 0$ ($N = 2$) e $S = 1/2$ ($N = 3$), enquanto que os estados excitados de menor energia, 3P ($N = 2$) e 4P ($N = 3$), são estados polarizados em *spin*, respectivamente com $S = 1$ e $S = 3/2$. Já na presença do campo, por causa da Eq. 2.29, a degenerescência dos estados com relação aos números quânticos M_L e M_S é levantada.

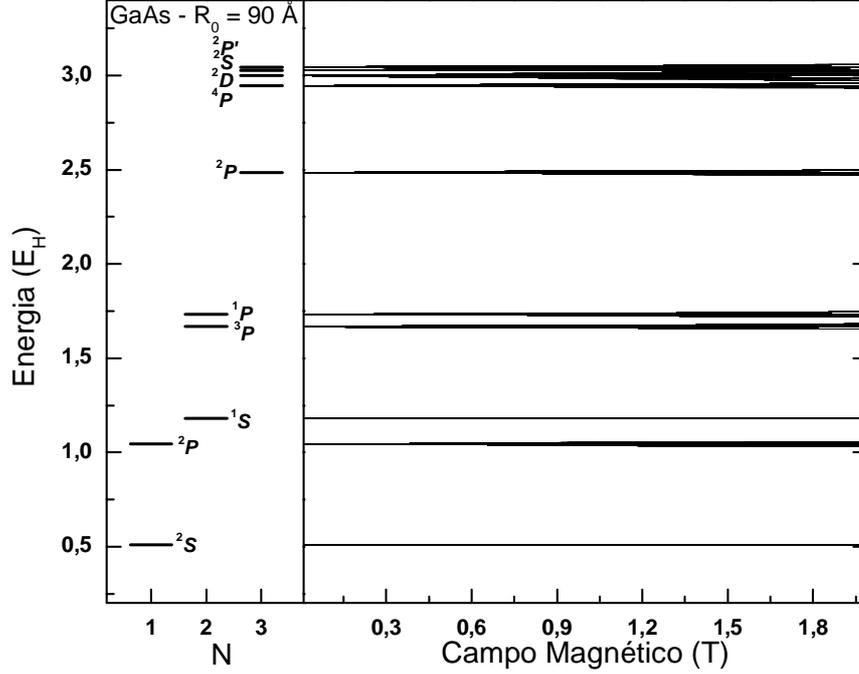


Figura 2.2: Níveis de energia para $N = 1, 2$ e 3 partículas de um PQ esférico de GaAs com raio $R_0 = 90 \text{ \AA}$. Por causa do baixo fator g desse material, cruzamentos de níveis são observados apenas em valores de campo magnético bem mais intensos do que no caso de um PQ de InSb, não visíveis nessa figura. Da Eq. 2.26, o campo é limitado por $B_{m_l} \simeq 170 \text{ T}$ e $B_{m_s} \simeq 2.5 \text{ T}$.

Pelo fato de o fator g do InSb ser duas ordens de magnitude maior do que o do GaAs, vários cruzamentos de níveis de energia são observados na Fig. 2.1, enquanto os mesmos estão completamente ausentes na Fig. 2.2. Em uma dada configuração de N elétrons na ilha, é a interação elétron-elétron quem determina o ordenamento dos estados ${}^{2S+1}L$ dentro de um dado multipletto, mas a energia magnética da Eq. 2.29 é capaz de alterar tal seqüência, como se observa na ilha de InSb com os estados 2P , 4P e 2D para $N = 3$ em $B_0 = 0.7 \text{ T}$. Tais cruzamentos de níveis de energia, que dependem de B_0 , R_0 , g e \tilde{m} , exercem influência

nas propriedades de magneto-transporte de PQ's esféricos, conforme abordado na próxima seção. Um fato importante a mencionarmos aqui é que diferentes simetrias espaciais produzem diferentes ordenamentos de estados dentro um dado multiplete; por exemplo, em um PQ quasi-unidimensional ([24], [34]), os estados polarizados em *spin* em um dado multiplete, a campo nulo, têm energias maiores do que os não polarizados, contrariamente ao que ocorre aqui.

2.4 Propriedades de transporte de uma ilha esférica

Seguindo-se a aproximação Hartree-Fock e trabalhando no esquema de acoplamento **LS** em um PQ esférico, os elementos matriciais das Eqs. 2.13 e 2.14 que definem as propriedades de transporte da ilha se tornam

$$C_{PQ_j, PQ_i} = \left| \sum_{l, m_l, s, m_s} \langle L_J M_{L_J}, S_J M_{S_J} | c_{l, m_l, s, m_s}^\dagger | L_I M_{L_I}, S_I M_{S_I} \rangle \right|^2, \quad (2.30)$$

com uma expressão análoga para B_{PQ_i, PQ_j} . Tal equação implica que o estado inicial (L_I, S_I) do PQ se acopla ao estado final (L_J, S_J) através dos momentos angulares (l, s) do elétron em transição. Os coeficientes de Clebsch-Gordan embutidos na Eq. 2.30 induzem então as regras de seleção

$$\left\{ \begin{array}{ll} S_J = S_I \pm 1/2, & M_{S_J} = M_{S_I} \pm 1/2, \\ L_J = L_I, L_I \pm 1, & M_{L_J} = M_{L_I}, M_{L_I} \pm 1, \end{array} \right\} \quad (2.31)$$

para que uma transição eletrônica seja permitida na ilha. Com relação aos processos de relaxação envolvendo fônons da Eq. 2.15, as únicas transições permitidas são aquelas entre estados com os mesmos números quânticos, ou seja, seus elementos matriciais devem satisfazer

$$D_{PQ_j, PQ_i} = D_{PQ_i, PQ_j} = \delta_{L_J, L_I} \delta_{M_{L_J}, M_{L_I}} \delta_{S_J, S_I} \delta_{M_{S_J}, M_{S_I}}. \quad (2.32)$$

Sob tais regras de seleção, podemos adiantar que o transporte eletrônico através da ilha será bloqueado quando as transições de $N = 2$ para $N = 3$, $^1S \rightarrow ^4P$, $^1P \rightarrow ^4P$ e $^1S \rightarrow ^2D$ forem ativadas; as duas primeiras (a última) são bloqueadas pelas regras de seleção em S (em L). Já os processos de relaxação são praticamente todos proibidos; o único permitido é entre os estados 2P e $^2P'$ de $N = 3$. A competição entre esses mecanismos de bloqueio em S e em L é amplamente discutida na próxima seção.

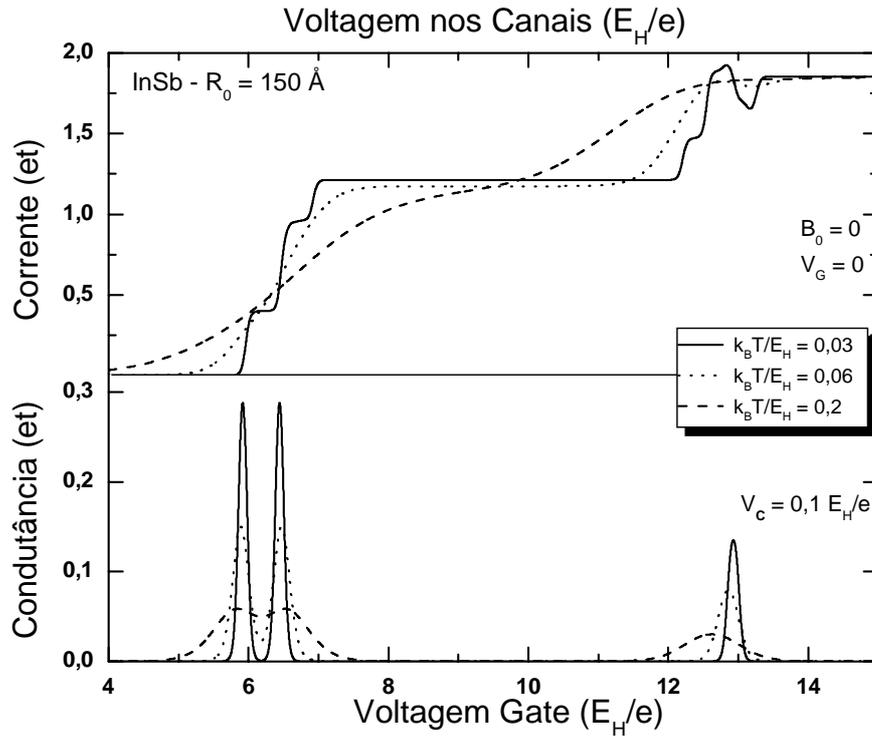


Figura 2.3: Aspectos gerais das curvas de transporte de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 150 \text{ \AA}$, em diferentes temperaturas e a campo magnético nulo. No Painel superior, corrente como função da voltagem nos canais; no Painel inferior, condutância como função da voltagem *gate*, ambas medidas em termos do parâmetro t (definido no texto), enquanto voltagens são ambas medidas em unidades efetivas. Por causa da alta energia cinética a esse raio, o terceiro pico de condutância, que marca o início de ocupação da segunda camada de energia do PQ, é bem afastado dos dois primeiros.

As figuras a seguir mostram as curvas de tunelamento eletrônico no sistema como função das voltagens aplicadas tanto aos canais, $V_C = (\mu_E - \mu_D)/e$, quanto ao *gate*, V_G ; referimo-nos a elas como curvas de corrente e de condutância, respectivamente, ambas plotadas em termos do parâmetro $t = t^E t^D / (t^E + t^D)$. As Figs. 2.3 e 2.4 mostram os aspectos gerais de tais curvas quando $V_G = B_0 = 0$ para um PQ esférico de InSb com raios de 150 e 500 Å, respectivamente. A baixas temperaturas, nota-se claramente as regiões de bloqueio de Coulomb (os *plateaus* na corrente e a distância entre picos na condutância) conforme as voltagens são aumentadas, fazendo a ilha ser gradativamente carregada com 1, 2 e 3 elétrons. A condutância apresenta três picos bem distintos relacionados à ocupação dos estados fundamentais do PQ, embora a corrente mostre degraus adicionais relativos aos estados excitados àquela dada ocupação da ilha; são esses estados excitados que causam regiões de corrente negativa vistas na formação do último *plateau*, a serem melhor discutidas na próxima seção. Vale lembrar que a posição de cada degrau na corrente está relacionada à transição ressonante entre dois estados do PQ, enquanto o tamanho de cada *plateau* reflete a diferença em energia entre duas ressonâncias consecutivas.

É interessante notar a estrutura de camadas do PQ na condutância; note que o terceiro pico está sempre mais distante e os dois primeiros estão sempre próximos entre si, refletindo o fato de que após a primeira camada da ilha ($1s$) estar preenchida com dois elétrons, o terceiro elétron irá iniciar a ocupação da segunda camada ($1p$), de maior energia. Quando o raio do PQ é maior (compare a Fig. 2.4 com a Fig. 2.3), o que implica uma importância maior da energia Coulombiana comparada à cinética, note que o terceiro pico na condutância está relativamente mais próximo do segundo, assim como o respectivo *plateau* na corrente é menor. Verifica-se ainda, aproximadamente, um fator de 2 entre a altura do terceiro pico e a dos dois da primeira camada, o que é uma marca tanto da interação elétron-elétron microscópica como da simetria espacial do problema, também a serem discutidas mais adiante. Como nota, no modelo de carregamento usual, onde a interação elétron-elétron é assumida constante, tanto a separação entre picos como o tamanho dos *plateaus* são mais regulares. Por fim, vemos o efeito esperado da temperatura: aumentando-a de forma a tornar a energia térmica $k_B T$ comparável à energia de carregamento do sistema ou à separação média dos estados da ilha, notamos que os *plateaus* na corrente se tornam suavizados, assim como as alturas (larguras) dos picos de condutância diminuem (aumentam); em outras palavras, o bloqueio de Coulomb é suprimido

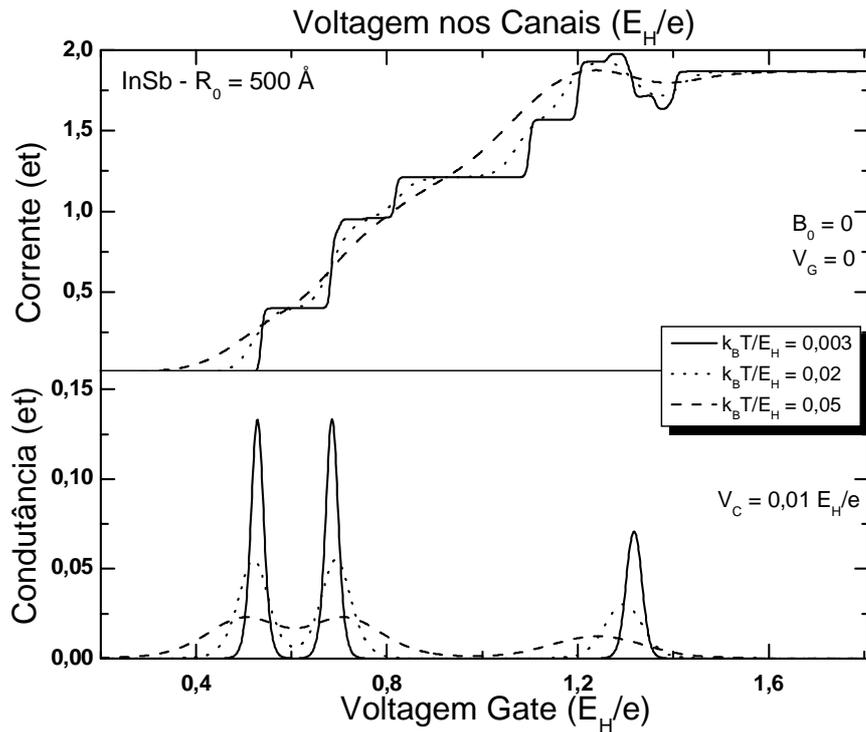


Figura 2.4: Aspectos gerais das curvas de transporte de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 500 \text{ \AA}$, em diferentes temperaturas e a campo magnético nulo. Por causa da menor energia cinética e da maior contribuição Coulombiana a esse raio, o terceiro pico de condutância está mais próximo dos dois primeiros do que ocorre na figura anterior.

em altas temperaturas. Esse mesmo comportamento qualitativo geral é verificado em um PQ esférico de GaAs.

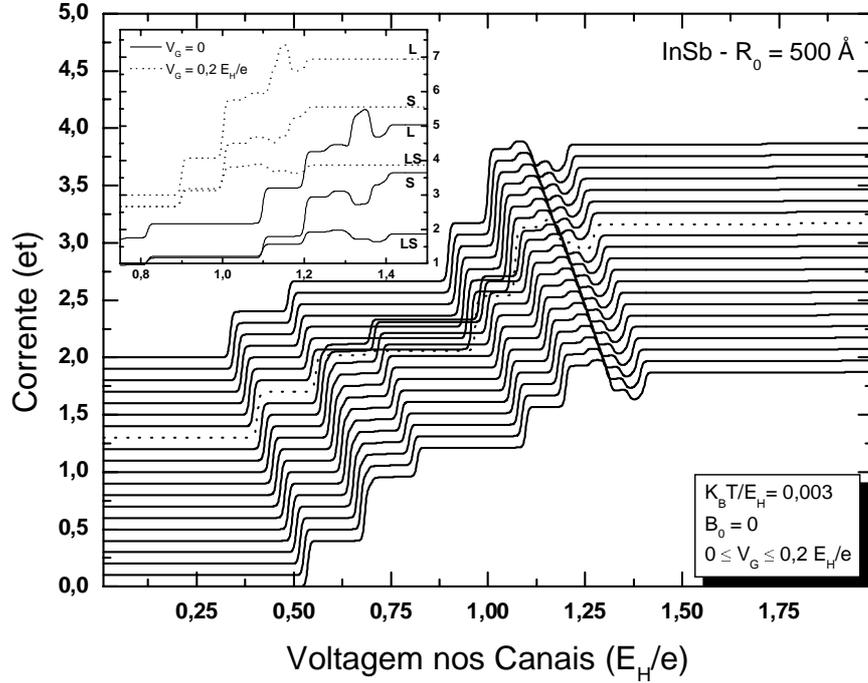


Figura 2.5: Influência da tensão *gate* na corrente de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 500 \text{ \AA}$, na ausência de campo magnético. Da primeira curva em $V_G = 0$ para a última em $V_G = 0,2 E_H/e$, o passo é de $0,01 E_H/e$. A curva pontilhada em $V_G = 0,13 E_H/e$ indica onde ocorre a supressão do terceiro *plateau* e onde os dois vales distintos na região de corrente negativa começam a ser formados. O *inset* compara, com as duas curvas extremas dessa figura, as influências na corrente das diferentes configurações dos estados Hartree-Fock possíveis no sistema: curva *L* (sem regras de seleção em *S*), curva *S* (sem regras de seleção em *L*), e curvas *LS* (ambas as regras de seleção).

Na Fig. 2.5 mostramos a influência de diferentes tensões *gate* aplicadas à ilha de InSb com $R_0 = 500 \text{ \AA}$, ainda na ausência de campo magnético e em uma baixa temperatura; V_G é variada de 0 a $0,2 E_H/e$ a partir da curva inferior em passos de $0,01 E_H/e$, fazendo com que as respectivas energias Hartree-Fock sejam progressivamente diminuídas, embora o ordenamento de estados e a seqüência de transições possíveis entre eles não se alterem. As principais características dessa figura são a supressão, depois da curva pontilhada relativa a $V_G = 0,13 E_H/e$, do terceiro *plateau* na corrente, o qual é relacionado a uma transição envolvendo estados excitados do PQ, e a formação de dois vales distintos de corrente negativa, conforme o último *plateau* começa a ser formado.

No *inset* da Fig. 2.5 comparamos separadamente as influências, sobre a formação das RCN's, das diferentes simetrias espacial e de *spin* dos estados de N -partículas da ilha, assumindo que estes possam ser caracterizados de 3 maneiras distintas: a) pelo esquema de acoplamento **LS**; b) considerando apenas o *spin* total S de forma a desconsiderar as regras de seleção em L ; c) levando em conta apenas o momento angular orbital total L e negligenciando então as regras de seleção em S ; isso é feito para as duas curvas extremas da Fig. 2.5, com $V_G = 0$ (curvas sólidas) e $0,2 E_H/e$ (curvas pontilhadas). É visível nesse *inset* a competição entre os dois mecanismos de bloqueio formando as RCN's, o de *spin* e o espacial, a serem detalhados na próxima seção; note que a posição da RCN é diferente nas curvas L e S puras, por causa dos diferentes estados bloqueados envolvidos. Note ainda que a inclusão do bloqueio espacial reduz a corrente total quando comparada ao caso em que apenas o bloqueio de *spin* é presente, pois o acoplamento **LS** mistura os efeitos dessas duas simetrias em diferentes valores de V_G . Pode-se notar que o mecanismo de bloqueio formando a RCN na curva L é mais intenso do que seu análogo na curva S , em ambas V_G 's, e que a RCN na curva L é menos afetada por uma mudança em V_G do que sua similar na curva S . Esses fatos salientam a importância da geometria do confinamento, presente nos estados de N -partículas, na determinação das propriedades de transporte de um PQ esférico, em especial perto das RCN's.

2.5 Bloqueios orbital e de *spin* e corrente negativa

Fazemos com as Figs. 2.6 e 2.7 (novamente relativas às curvas extremas da Fig. 2.5) um estudo detalhado de cada uma das transições que tem algum papel na evolução da corrente com V_G ; a análise dos estados do PQ ativados em uma dada transição é feita com base na evolução de suas populações com V_G . Observe que reescalamos a corrente para uma melhor comparação e lembre que os estados envolvidos estão mostrados na Fig. 2.1; além disso, adotamos nessa discussão a notação $^{2S+1}L_N$, onde o novo subscrito indica o número de partículas do estado.

Na Fig. 2.6, a corrente é zero para $V_G < 0,54 E_H/e$ já que nenhum estado do PQ está populado. Nesta voltagem, o primeiro elétron entra na ilha via transição para o estado fundamental 2S_1 . O segundo degrau em $V_G = 0,68 E_H/e$ é relativo a transição $^2S_1 \rightarrow ^1S_2$, de forma que o estado fundamental para $N = 2$ começa a ser populado; note que os estados 2P_1 e 3P_2 também ganham população, embora ressonâncias envolvendo-os só ocorram em valores maiores

de V_C . Tal rearranjo simultâneo de populações, mesmo fora da ressonância, ocorre em diversas outras voltagens. Na borda deste segundo degrau, em $V_C = 0,7 E_H/e$, a transição ${}^2P_1 \rightarrow {}^1P_2$ é ativada, produzindo um pequeno bloqueio; vale salientar que as transições ${}^2P_1 \rightarrow \{{}^1S_2, {}^3P_2\}$ são respectivamente ressonantes em $V_C = 0,12$ e $0,64 E_H/e$, porém, elas em nada influem na corrente já que esses estados ainda não estão populados à essas voltagens. No centro do segundo *plateau*, em $V_C = 0,75 E_H/e$, a transição ${}^1P_2 \rightarrow {}^2P_3$ é ativada e o estado fundamental para $N = 3$ começa a receber carga.

O terceiro degrau na corrente em $V_C = 0,81 E_H/e$ ocorre devido à transição ${}^3P_2 \rightarrow {}^2P_3$, e o sistema fica então bloqueado até que, em $V_C = 1,1 E_H/e$, uma transição para o estado 2P_1 provoca o quarto degrau na corrente; nessa voltagem, a população de muitos outros estados também muda: 2S_1 e 1S_2 são depopulados, enquanto 3P_2 , 1P_2 e 2P_3 são populados, mas ressonâncias envolvendo esses estados não ocorrem nessa voltagem. O quinto degrau em $V_C = 1,2 E_H/e$ deve-se principalmente à transição ${}^2S_1 \rightarrow {}^3P_2$, embora os estados 2P_1 , 1P_2 e 2P_3 (1S_2) também estejam ganhando (perdendo) parte de suas populações nessa voltagem. Quando $V_C = 1,25 E_H/e$ a transição ${}^1P_2 \rightarrow {}^4P_3$ deveria ser observada, porém, ela viola as regras de seleção em S e nenhum novo degrau deveria ser visto na corrente; entretanto, logo depois, em $V_C = 1,26 E_H/e$, a ressonância de ${}^2S_1 \rightarrow {}^1P_2$ é alcançada e um pequeno sexto degrau ocorre então na corrente.

Chegamos enfim às RCN's, onde há oito possíveis ressonâncias quando V_C está no intervalo de $1,3$ a $1,4 E_H/e$; note que apenas os estados com $N = 3$ ($N = 1, 2$) estão ganhando (perdendo) população nesse trecho. Quando V_C alcança $1,30$ e $1,31 E_H/e$, que são as respectivas ressonâncias para as transições ${}^1P_2 \rightarrow {}^2D_3$ e ${}^3P_2 \rightarrow {}^4P_3$, a corrente, em vez de aumentar, mostra seu primeiro decréscimo. Embora tais transições sejam permitidas, percebemos que o estado polarizado em *spin*, 4P_3 , se torna o mais populado neste intervalo às custas de uma depopulação de outros estados do PQ, principalmente 2P_1 , 3P_2 , 2P_3 e 1P_2 . Então, por causa das regras de seleção em S , a vida média desse estado se torna muito alta, e a probabilidade de o sistema transitar desta para outra configuração não polarizada em *spin* diminui drasticamente. Podemos assim identificar este primeiro decréscimo na corrente (primeira RCN) como sendo causado pelo mecanismo de bloqueio de *spin*, já abordado, entre outras, pelas Refs. [43] e [44]. Aumentando mais a voltagem, quando V_C alcança $1,32$, $1,33$ e $1,34 E_H/e$, as transições ${}^1P_2 \rightarrow {}^2S_3$, ${}^1S_2 \rightarrow {}^2P_3$ e ${}^1P_2 \rightarrow {}^2P'_3$ são respectivamente ativadas; o estado polarizado em *spin* também

perde população e a corrente permanece no curto *plateau*, logo antes da segunda RCN.

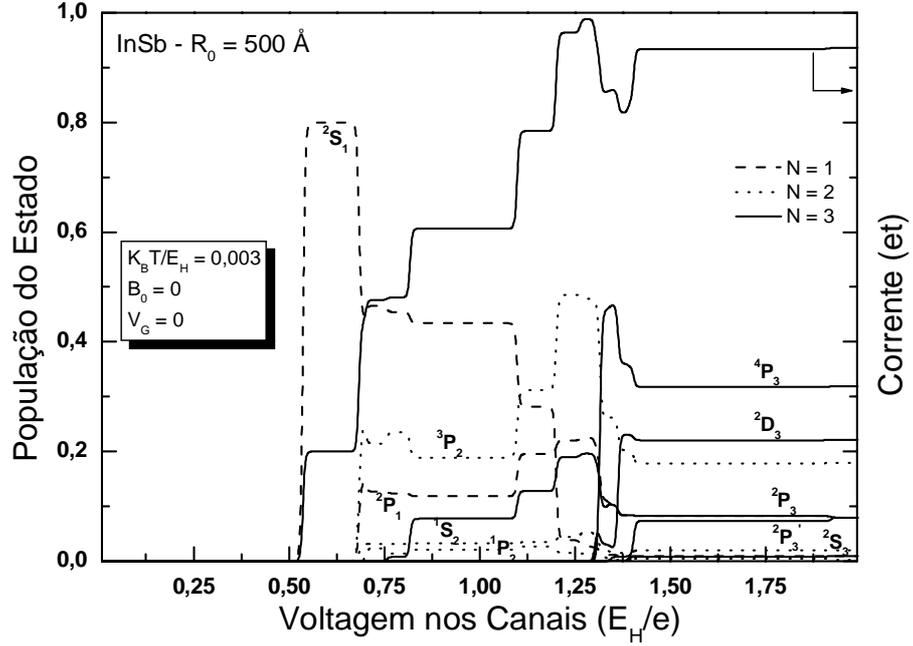


Figura 2.6: Análise de populações mostrando os estados que têm papel na formação da corrente da primeira curva ($V_G = 0$) da Fig. 2.5. Linhas tracejadas, pontilhadas e sólidas indicam, respectivamente, os estados com $N = 1$, $N = 2$ e $N = 3$ da Fig. 2.1. Os dois piores estados condutores, 4P_3 (bloqueio em S) e 2D_3 (bloqueio em L), são os mais populados em altas tensões.

Essa segunda RCN é marcada pelo pequeno vale visível entre as tensões de 1,36 e 1,38 E_H/e , as quais são as respectivas ressonâncias para as transições ${}^3P_2 \rightarrow {}^2D_3$ e ${}^3P_2 \rightarrow {}^2S_3$. Vemos que no início dessa região o estado 2D_3 ganha quase toda sua população, enquanto o estado polarizado em *spin* 4P_3 é depopulado. Lembremos que 2D_3 é o estado de maior momento angular orbital ($L = 2$) do sistema e, por causa das regras de seleção em L , sua vida média é muito elevada; o sistema fica então preso nesse estado, com baixa probabilidade de deixá-lo. Em analogia ao bloqueio de *spin* da primeira RCN, podemos identificar e rotular esse novo mecanismo que dá origem à segunda RCN como bloqueio orbital. Esse bloqueio adicional é totalmente causado pela simetria espacial (geometria do confinamento) do PQ, e não seria observado na corrente se tivéssemos levado em conta apenas o grau de liberdade de *spin* na descrição do sistema. Vale ainda ressaltar que uma diferente geometria causaria diferentes características na corrente, principalmente porque o ordenamento de estados não

seria o mesmo aqui presente; tomando novamente como exemplo um PQ quasi-unidimensional ([24], [34]), onde obviamente a classificação em L dos estados perderia o sentido e os estados polarizados em *spin*, como já mencionamos, seriam os de maior energia em um dado multiplete excitado (relembre na Fig. 2.1 que eles são os de menor energia em uma ilha esférica), esse reordenamento de níveis traria diferentes efeitos na formação das RCN's.

No fim do intervalo definindo a segunda RCN, ambos os estados proibidos 4P_3 e 2D_3 são parcialmente depopulados, até que em $V_C = 1,40 E_H/e$, a transição ${}^3P_2 \rightarrow {}^2P'_3$ é ativada levando a um novo aumento da corrente, de forma que o sistema deixa as RCN's e forma o último *plateau* na corrente. Vale notar que a corrente após as RCN's é menor do que antes, o que se deve justamente ao fato de os dois piores estados condutores, 4P_3 e 2D_3 , serem os mais populados em altas voltagens. Por fim, há ainda um último degrau extremamente pequeno no intervalo $1,83 - 1,92 E_H/e$, causado pela ativação das transições ${}^1S_2 \rightarrow \{{}^4P_3, {}^2D_3, {}^2S_3, {}^2P'_3\}$; as duas primeiras são bloqueadas devido respectivamente aos bloqueios de *spin* e orbital, e as duas últimas têm uma contribuição insignificante para a corrente por causa da pequena população alcançada pelos respectivos estados a essas voltagens.

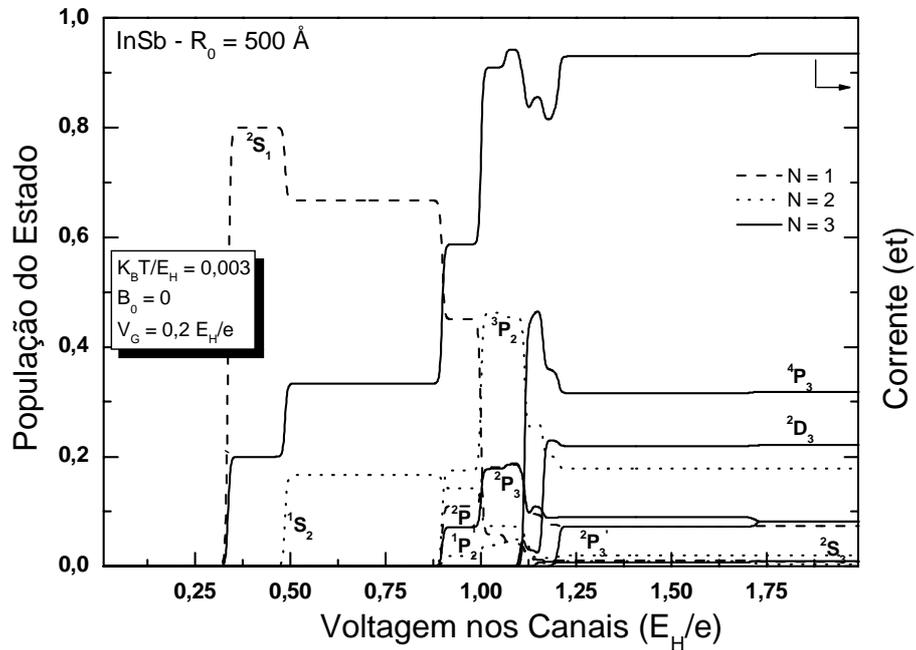


Figura 2.7: Análise de populações mostrando os estados que têm papel na formação da corrente da última curva ($V_G = 0,2 E_H/e$) da Fig. 2.5. A maioria dos estados só começa a ser populada em voltagens maiores do que o caso de voltagem nula da figura anterior.

Depois dessa descrição detalhada da Fig. 2.6, referente ao caso $V_G = 0$, a compreensão da Fig. 2.7, relativa ao caso $V_G = 0,2 E_H/e$, se torna mais simples. Vamos aqui enfatizar apenas as duas principais diferenças induzidas por uma voltagem *gate* finita que, como anteriormente exposto, são a supressão do terceiro degrau na corrente e a clara formação de dois vales distintos de corrente negativa; ambas são basicamente causadas pela redistribuição da população dos estados do PQ em uma V_G não nula. Com relação à supressão do degrau, fica claro, para $V_G < 0,87 E_H/e$, que as transições que o causavam não são mais existentes já que os respectivos estados ainda estão totalmente depopulados à essa V_G ; note que tais estados (2P_3 , 1P_2 , 3P_2 e 2P_1) são agora ativados apenas em maiores V_G 's. Com relação aos vales nas RCN's, essa maior voltagem *gate* é capaz de definir mais claramente dois distintos vales de corrente negativa, cada um relacionado a um dos tipos de bloqueio anteriormente mencionados. Um último detalhe é que agora a corrente após as RCN's, no último *plateau*, tem praticamente o mesmo valor que antes; se aumentássemos ainda mais V_G , ela se tornaria maior que antes das RCN's. Vale lembrar que as considerações feitas aqui são estritamente válidas quando $R_0 < a_B$, de forma que as autofunções da Eq. 2.16 formam uma boa base de 1-partícula para o PQ esférico, e a interação elétron-elétron pode ser considerada como uma perturbação ao sistema.

2.6 Efeitos do campo magnético na corrente

Nas Figs. 2.8 e 2.9 mostramos aspectos gerais da influência do campo magnético sobre as propriedades de transporte de um PQ esférico de InSb e GaAs, respectivamente, com raios de 150 e 90 Å; por causa do alto fator g e do menor raio comparado a a_B da ilha de InSb, as restrições da Eq. 2.26 permitem o uso de um campo $B_0 < 15 T$, enquanto que para a ilha de GaAs somos restritos a $B_0 < 2 T$. Focando nas regiões de corrente negativa, os principais efeitos de um aumento no campo B_0 na ilha de InSb, em $V_G = 0$, são: a) novas e pequenas RCN's surgem na corrente, tanto antes quanto depois daquelas existentes a campo nulo, um efeito diretamente ligado aos níveis magnéticos de energia, suas dependências com relação às projeções M_L e M_S (veja Fig. 2.1, embora em outro raio), e suas respectivas regras de seleção (veja Eq. 2.31); b) larguras e profundidades das RCN's diminuem por causa do aumento do número de transições possíveis que podem mudar a população de cada estado responsável pelos mecanismos de bloqueio; c) em materiais com um alto fator g , o ordenamento dos estados

excitados responsáveis pelas RCN's pode ser alterado em específicos valores de B_0 .

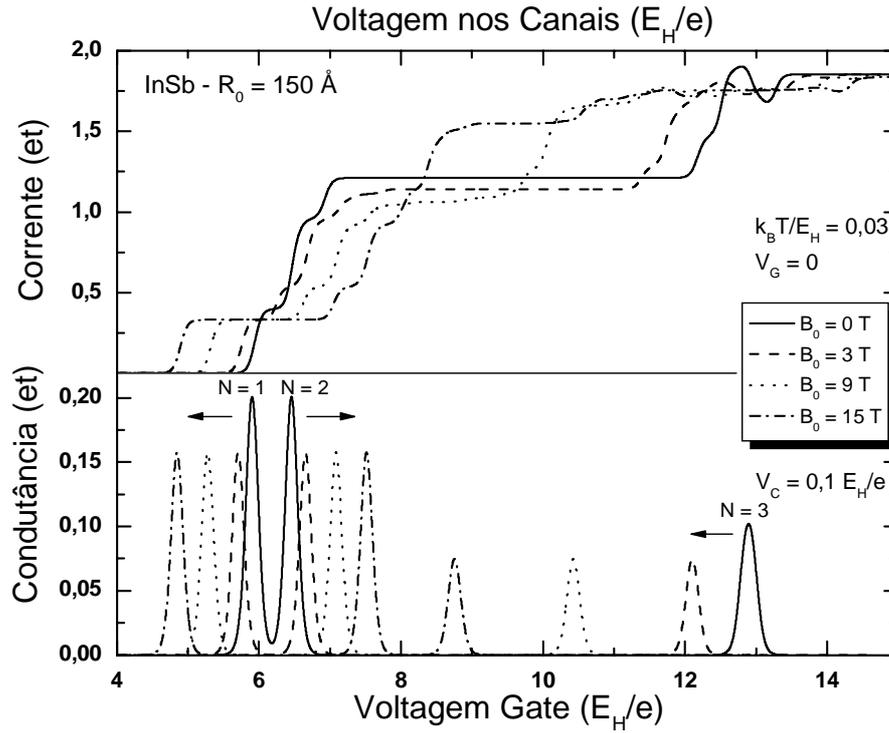


Figura 2.8: Influência do campo magnético nas propriedades de transporte de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 150 \text{ \AA}$ a temperatura constante. Os picos na condutância relativos a N ímpar (par) se movem para esquerda (direita) como uma clara assinatura do efeito Zeeman no sistema.

Um claro efeito da mudança desse ordenamento causada pelo levantamento das degenerescências orbital e de *spin* é visível nas posições dos picos de condutância da Fig. 2.8; observe que os picos relativos a N ímpar (par) se movem para a esquerda (direita) na figura, e daí a separação entre os picos com $N = 1$ e $N = 2$ ($N = 2$ e $N = 3$) aumenta (diminui) ao aumentarmos o campo magnético. Esses picos ainda indicam as voltagens em que os estados fundamentais da ilha, para cada N , são totalmente populados, significando que um novo elétron foi adicionado ao PQ. Note que as curvas de condutância não são uma derivada das curvas de corrente, pois características de estados excitados não são nelas observadas.

Efeitos magnéticos são praticamente negligenciáveis em PQ's esféricos de GaAs, principalmente por causa de seu baixo fator g . Ao compararmos as Figs. 2.9 e 2.2 fica claro que seus níveis magnéticos de energia são pouco modificados e, como consequência, suas propriedades de transporte são pouco afetadas pela aplicação de um campo magnético externo.

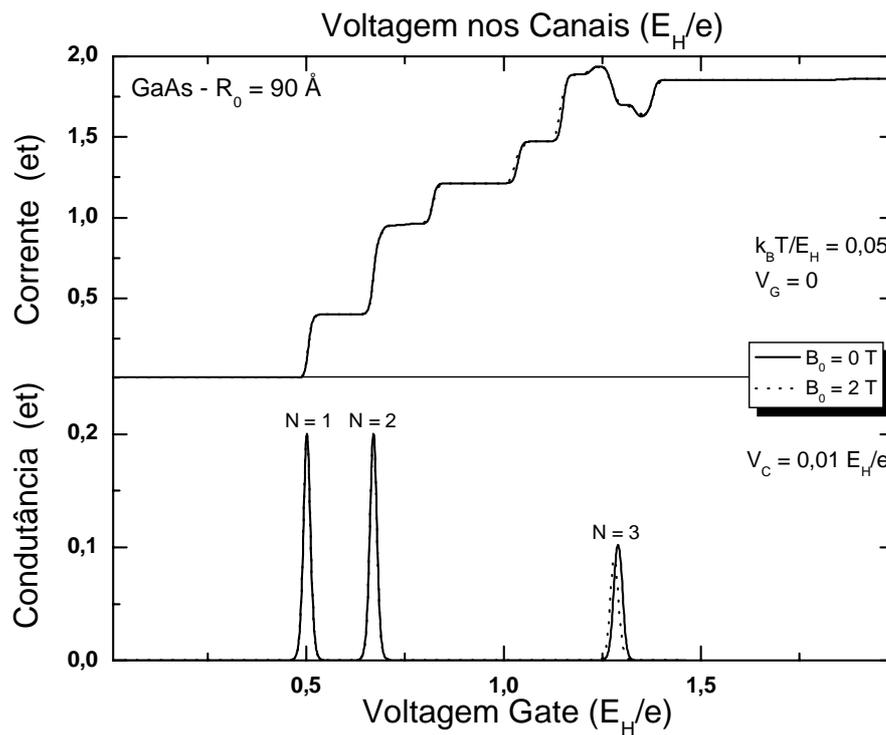


Figura 2.9: Influência do campo magnético nas propriedades de transporte de um PQ esférico de GaAs com raio $R_0 = 90 \text{ \AA}$ a temperatura constante. Por causa do baixo fator g e da consequente fraca energia Zeeman no sistema, praticamente nenhuma característica magnética é visível na figura a tais valores permitidos do campo magnético.

Na Fig. 2.10 fazemos uma análise análoga à feita na Fig. 2.5, agora na presença de um campo magnético $B_0 = 1 T$. Em adição aos aspectos gerais já mencionados na discussão da Fig. 2.8 (embora feita em outro raio) para $V_G = 0$, observamos que com um aumento na voltagem *gate* a campo finito: a) as transições que causam o terceiro *plateau* a campo nulo não são mais suprimidas (compare Figs. 2.10 e 2.5); b) a forma geral das RCN's não se altera para $V_G > 0$; c) os dois vales de corrente negativa a campo nulo são alargados em um campo finito; d) o valor da corrente antes e depois das RCN's é praticamente o mesmo para qualquer V_G . Vemos ainda no *inset* que, também na presença de um campo magnético, o bloqueio orbital é mais efetivo do que o bloqueio de *spin* na definição das propriedades de transporte de PQ's esféricos.

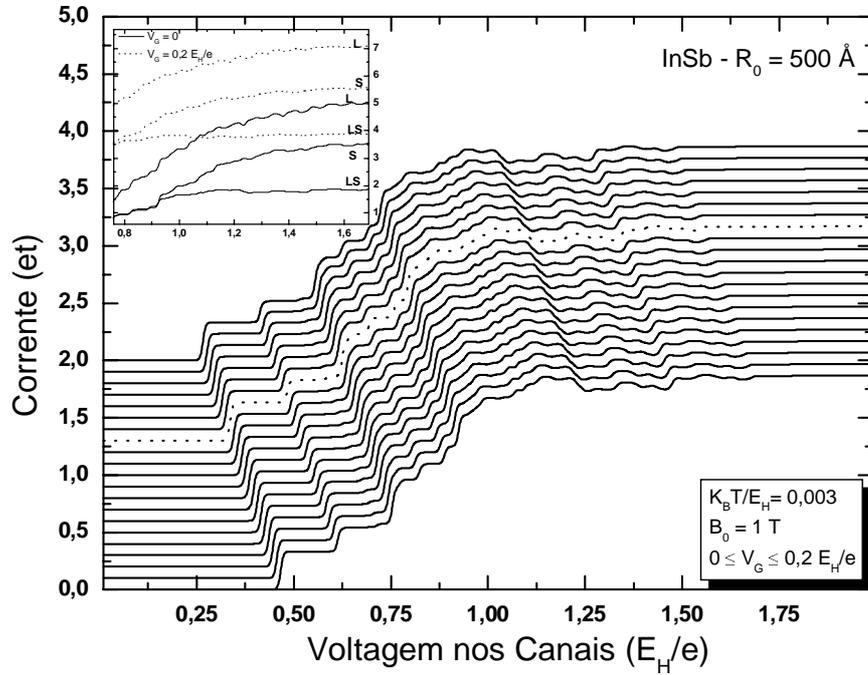


Figura 2.10: Influência da voltagem *gate* na corrente de um PQ esférico de InSb com raio $R_0 = 500 \text{ \AA}$, na presença de campo magnético $B_0 = 1 T$. Sob tal campo, esses valores da voltagem *gate* em nada influenciam a corrente do sistema. A curva pontilhada é calculada para a mesma voltagem de sua similar na Fig. 2.5, onde ocorria a supressão do terceiro *plateau* na corrente. As duas regiões de corrente negativa são mais alargadas do que no caso a campo nulo. O *inset* faz o mesmo tipo de comparação realizada na Fig. 2.5 para as três possíveis configurações dos estados Hartree-Fock do PQ esférico.

2.7 Interação elétron-fônon

Com relação à influência da interação elétron-fônon sobre as propriedades de transporte do sistema, as regras de seleção na Eq. 2.32 e a conservação de energia embutida nos processos de relaxação dentro da ilha impõem restrições bem mais fortes para que uma transição envolvendo acoplamento elétron-fônon seja observada. Como consequência desse chamado efeito gargalo, mudanças na corrente do sistema induzidas por tal acoplamento, em qualquer material, são praticamente imperceptíveis no formalismo aqui usado, uma vez que a probabilidade de um portador emitir ou absorver um fônon se torna rara; esse fato é o reflexo das regras de seleção da Eq. 2.32, as quais impõem que para um dada transição via fônons ser possível entre dois estados da ilha, todos os números quânticos desses dois estados devem ser os mesmos.

2.8 Ponto quântico unidimensional

Consideramos brevemente nessa seção algumas propriedades de uma ilha de GaAs de comprimento $L_C = 15 a_B$, definida por um potencial quadrado quasi-1D; usamo-la aqui apenas como um contraponto à geometria esférica usada até agora. O espectro é reproduzido da Ref. [34]. A interação elétron-elétron é descrita por $V_{ee}(x, x') = e^2 \left[\varepsilon \left((x - x')^2 + \lambda_c^2 \right)^{1/2} \right]^{-1}$, que é Coulombiana em grandes distâncias eletrônicas, e tem um parâmetro de corte λ_c em pequenas distâncias para evitar divergências nos elementos matriciais. Os estados de menor energia de um PQ 1D com até 4 elétrons são caracterizados apenas pelo *spin* total S , e suas energias estão dadas na Tab. II.4. Na presença de um campo B_0 , a energia Zeeman $g\mu_B B_0 M_S$ levanta a degenerescência presente a campo nulo, e deve ser adicionada àquelas dadas na Tab. II.4. Como já mencionado, os estados polarizados em *spin* são, nessa geometria, os de maior energia nos respectivos multipletos. O cálculo da corrente segue o mesmo formalismo usado até aqui, a diferença sendo que agora não há qualquer regra de seleção com relação a L .

Apenas como ilustração dessa geometria, mostramos na Fig. 2.11 os efeitos da interação elétron-fônon nas propriedades de transporte dessa ilha unidimensional. Os efeitos de temperatura e campo magnético são qualitativamente análogos ao caso de uma ilha esférica. Nessa figura comprovamos que os processos de relaxação elétron-fônon têm pouca influência na corrente eletrônica; note que mesmo em uma razão $r/t = 20$, onde tais processos podem ocorrer com muito maior frequência do que o tunelamento ilha-canais, as características gerais do trans-

Tabela II.4: Os treze estados de menor energia de uma ilha unidimensional populada por até 4 elétrons. Também indicados estão o spin total e a energia de cada um dos estados.

α	N_α	S_α	E_α/E_H
1	0	0	0,0
2	1	1/2	0,0225
3	2	0	0,2972
4	2	1	0,3572
5	3	1/2	0,9654
6	3	1/2	1,1054
7	3	3/2	1,1754
8	4	0	2,1480
9	4	1	2,2666
10	4	1	2,3939
11	4	0	2,4598
12	4	1	2,5212
13	4	2	2,5739

porte nesses sistemas são pouco afetadas. Observe também que as regiões de corrente negativa, causadas pelo bloqueio de *spin*, ocorrem nos terceiro e quarto *plateaus*, onde os respectivos estados polarizados têm $S = 3/2$ ($N = 3$) e $S = 2$ ($N = 4$).

2.9 Considerações

Para concluir esse capítulo, enfatizamos que a abordagem usada para o trato de uma ilha 3D sob um potencial esférico pode ser estendido para um potencial parabólico ($V(\mathbf{r}) \simeq r^2$), onde poderíamos incluir os efeitos, inclusive, da interação *spin*-órbita, de forma que os estados passariam a ser caracterizados pelo momento angular total J . A contribuição dessa interação é nula em um potencial esférico infinito; isso decorre do fato de ela ser proporcional à integral $\langle n, l, m_l | dV(r)/dr | n, l, m_l \rangle$ calculada de $r = 0$ a $r = R_0$, sendo que $dV(r)/dr = \delta(r - R_0)$ nesse potencial, e a parte radial da função de onda se anula em $r = R_0$ por causa da condição de contorno. Vale por fim ressaltar que se o potencial confinante tiver alguma deformação, as regras de seleção em L e em S começam a perder a validade, e a abordagem aqui usada deixa de ser totalmente válida. No próximo capítulo veremos uma outra abordagem, mais apropriada para se lidar com um maior número de partículas do que os cálculos analíticos desse capítulo possibilitam; também faremos uma comparação entre as energias dos estados fundamentais de um PQ com 2 e 3 partículas obtidas nesse e no próximo capítulos.

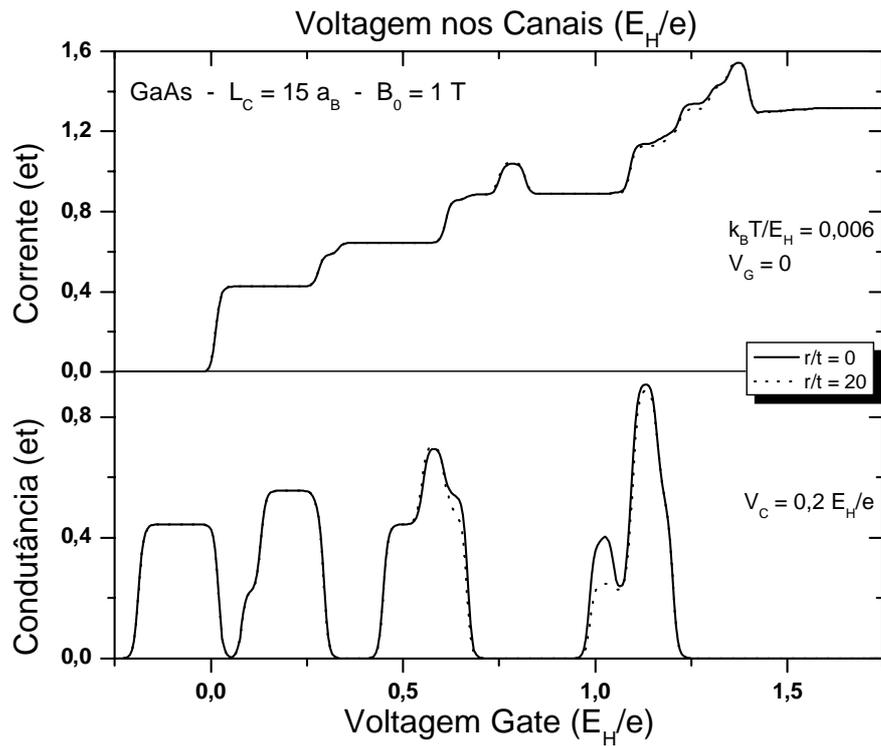


Figura 2.11: Influência do acoplamento elétron-fônon em uma ilha de GaAs unidimensional com comprimento $L_C = 15 a_B$. Note que mesmo quando $r \gg t$, o tunelamento eletrônico é pouco afetado pelos processos de relaxação elétron-fônon na ilha.

Capítulo III

Abordagem Hartree-Fock autoconsistente para sistemas confinados

Para superar a limitação do baixo número de partículas que pode ser razoavelmente realizado na construção analítica dos estados da ilha no acoplamento **LS** (que envolve uma soma crescente de determinantes de Slater), usamos nesse capítulo duas formulações matriciais numéricas auto-consistentes derivadas da teoria Hartree-Fock, factíveis para qualquer N e adaptadas para sistemas confinados, que serão aplicadas no mesmo sistema do capítulo anterior. A primeira é a de Roothaan ([107]), apropriada para sistemas de camada fechada, e a segunda é a de Pople-Nesbet ([108]), apropriada para sistemas de camada aberta. Nelas, não partimos mais de um estado exato, com L e S definidos, dado por combinações apropriadas de determinantes de Slater; em vez disso, partimos de um único determinante (configuração) inicial. O estado fundamental do sistema com um dado N é obtido pela minimização da energia considerando esse determinante como função-teste. No que se refere ao desenvolvimento do formalismo, optamos em apenas relacionar suas equações básicas, sem nos atermos muito aos detalhes dos cálculos ([109]). Ênfase será dada à influência do campo magnético, mesmo em sistemas de camada fechada, na otimização da base gaussiana usada em nossos cálculos, no espectro fundamental a campo nulo de 40 partículas na ilha, na estrutura de camadas do espectro, denunciada tanto pelo potencial químico da ilha como por sua energia de carregamento, e na aplicabilidade da regra de Hund, onde veremos como um campo magnético será capaz de violá-la.

3.1 Expressões gerais

A aproximação Hartree-Fock assume que o estado fundamental de um sistema de N -elétrons interagentes é dado pelo determinante de Slater $|\Psi_0\rangle = |\chi_1\chi_2\cdots\chi_a\chi_b\cdots\chi_{N-1}\chi_N\rangle$, onde os orbitais de *spin* otimizados $\{\chi_a|a = 1\dots N\}$ são obtidos pela minimização da energia desse estado, que é dada por

$$E_0 = \langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle = \sum_a h_{aa} + \frac{1}{2} \sum_a \sum_b [J_{ab} - K_{ab}] , \quad (3.1)$$

onde $h_{aa} = \langle\chi_a|h|\chi_a\rangle$, $J_{ab} = \langle\chi_a|J_b|\chi_a\rangle$, e $K_{ab} = \langle\chi_a|K_b|\chi_a\rangle$ representam, respectivamente, as contribuições cinética e elétron-elétron direta e de troca para a energia total do sistema, explicitadas a seguir. A equação integro-diferencial de Hartree-Fock que determina o conjunto de orbitais $\{\chi_a\}$ é

$$f|\chi_a\rangle = \varepsilon_a|\chi_a\rangle , \quad (3.2)$$

em que o operador de Fock

$$f = h_a + \sum_b [J_b - K_b] \quad (3.3)$$

atua em $|\chi_a\rangle$ na forma

$$\begin{aligned} h_a|\chi_a\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2|\chi_a\rangle , \\ J_b|\chi_a\rangle &= \left[\int d^4\mathbf{x}_2 \chi_b^*(2) \frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \chi_b(2) \right] |\chi_a\rangle , \\ K_b|\chi_a\rangle &= \left[\int d^4\mathbf{x}_2 \chi_b^*(2) \frac{e^2}{\varepsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \chi_a(2) \right] |\chi_b\rangle , \end{aligned} \quad (3.4)$$

fornecendo assim as definições de h_{aa} , J_{ab} , e K_{ab} acima. O potencial de confinamento $V(\mathbf{r})$ deveria claramente ser adicionado a h_a acima; no entanto, como usaremos aqui um potencial esférico infinito, optamos em já excluí-lo de todas as expressões aqui consideradas. Como os orbitais $\{\chi_a\}$ envolvem tanto a parte espacial quanto a parte em *spin*, o símbolo $d^4\mathbf{x}_2$ é usado nas integrais. As energias desses orbitais são obtidas como

$$\varepsilon_a = \langle\chi_a|f|\chi_a\rangle = h_{aa} + \sum_b [J_{ab} - K_{ab}] , \quad (3.5)$$

mostrando-nos que $E_0 \neq \sum_a^N \varepsilon_a$ (compare Eqs. 3.5 e 3.1). Note que a auto-consistência dessa abordagem reside no fato de que o próprio operador f depende de sua solução $\{\chi_a\}$; o

procedimento numérico é usar uma tentativa inicial para os orbitais de *spin* e resolver a Eq. 3.2 iterativamente, até que E_0 calculado em cada iteração convirja a uma dada precisão, que consideramos aqui ser de 10^{-9} eV. O resultado assim encontrado fornece o conjunto $\{\chi_a\}$ que minimiza a Eq. 3.1 e explicita $|\Psi_0\rangle$.

A formulação expressa até agora é totalmente genérica, já que nenhuma suposição foi ainda tomada sobre a forma dos orbitais $\{\chi_a\}$; é nessa suposição que diferem as abordagens matriciais de Roothaan e Pople-Nesbet detalhadas a seguir.

3.2 Formalismo Restrito de Roothaan

A primeira suposição consiste em assumir que as funções de *spin* α (*up*) e β (*down*) são restritas a terem a mesma função espacial, o que corresponde ao chamado método Hartree-Fock Restrito ([109]). Ou seja, assume-se que $\chi_i(\mathbf{x}) = \{\psi_j(\mathbf{r})\alpha(\omega), \psi_j(\mathbf{r})\beta(\omega)\}$, de forma que o estado fundamental do sistema fica dado por $|\Psi_0^{HFR}\rangle = |\psi_1\bar{\psi}_1\dots\psi_a\bar{\psi}_a\dots\psi_{N/2}\bar{\psi}_{N/2}\rangle$, onde uma função espacial com (sem) barra superior indica que seu *spin* é *down* (*up*); dessa maneira, os orbitais espaciais $\{\psi_a|a = 1\dots N/2\}$ são duplamente ocupados e $|\Psi_0^{HFR}\rangle$ representa então um sistema de camadas fechadas com L e S nulos. Quando integramos a dependência em *spin* nesse formalismo restrito encontramos equações análogas às Eqs. 3.1-3.5. As substituições a serem feitas são: o conjunto $\{\chi_a\}$ nas Eqs. 3.2, 3.4 e 3.5 é trocado pelo conjunto $\{\psi_a\}$; a Eq. 3.4 é agora integrada em $d^3\mathbf{r}_2$ e não mais em $d^4\mathbf{x}_2$; o operador de Fock de camada fechada da Eq. 3.3 se torna

$$f = h_a + \sum_b^{N/2} [2J_b - K_b] ; \quad (3.6)$$

a energia do estado fundamental na Eq. 3.1 a ser minimizada fica

$$E_0^{HFR} = \langle \Psi_0^{HFR} | H | \Psi_0^{HFR} \rangle = 2 \sum_a^{N/2} h_{aa} + \sum_a^{N/2} \sum_b^{N/2} [2J_{ab} - K_{ab}] ; \quad (3.7)$$

e as energias dos orbitais espaciais da Eq. 3.5 se tornam

$$\varepsilon_a = h_{aa} + \sum_b^{N/2} [2J_{ab} - K_{ab}] , \quad (3.8)$$

onde agora $h_{aa} = \langle \psi_a | h | \psi_a \rangle$, $J_{ab} = \langle \psi_a | J_b | \psi_a \rangle$, e $K_{ab} = \langle \psi_a | K_b | \psi_a \rangle$. Note novamente que $E_0^{HFR} \neq \sum_a^{N/2} \varepsilon_a$.

A abordagem de Roothaan ([109]) consiste em se reescrever essas equações restritas em uma forma matricial. Para isso, expande-se o conjunto $\{\psi_i | i = 1 \dots k\}$ que se quer determinar, em um conjunto de funções de base conhecidas $\{\phi_\nu | \nu = 1 \dots k\}$, ou seja,

$$\psi_i = \sum_{\nu} C_{\nu i} \phi_{\nu} , \quad (3.9)$$

em que os orbitais espaciais com $k > N/2$ são desocupados. Dessa maneira, os coeficientes da expansão $C_{\nu i}$ se tornam os parâmetros a serem iterados. Ao inserirmos essa expansão na Eq. 3.6 e a multiplicarmos à esquerda por $\phi_{\mu}^*(\mathbf{r})$, obtemos a expressão matricial $k \times k$ característica do método de Roothaan,

$$\mathbf{FC} = \mathbf{SC}\boldsymbol{\varepsilon} , \quad (3.10)$$

em que \mathbf{S} é a matriz definida positiva de overlap entre as funções da base, com seus elementos sendo

$$S_{\mu\nu} = \int d^3\mathbf{r} \phi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \phi_{\nu}(\mathbf{r}) , \quad (3.11)$$

\mathbf{C} é a matriz dos coeficientes da expansão $C_{\nu i}$, cujas colunas descrevem cada orbital espacial ψ_i , $\boldsymbol{\varepsilon}$ é a matriz diagonal das energias orbitais ε_i , e \mathbf{F} é a matriz do operador de Fock f , cujos elementos são

$$F_{\mu\nu} = \int d^3\mathbf{r} \phi_{\mu}^*(\mathbf{r}) f \phi_{\nu}(\mathbf{r}) . \quad (3.12)$$

Para explicitarmos a matriz de Fock, é conveniente introduzirmos a densidade de carga do sistema, que para um caso de camadas fechadas descrito por um determinante simples com cada orbital espacial duplamente ocupado, é escrita como

$$\rho(\mathbf{r}) = 2 \sum_a^{N/2} |\psi_a(\mathbf{r})|^2 , \quad (3.13)$$

de forma que a integral de $\rho(\mathbf{r})$ em todo o espaço fornece N . Ao inserirmos a Eq. 3.9 em $\rho(\mathbf{r})$ encontramos

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} \sum_{\nu} P_{\mu\nu} \phi_{\mu}(\mathbf{r}) \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}) , \quad (3.14)$$

onde definimos a matriz densidade \mathbf{P} cujos elementos são dados por

$$P_{\mu\nu} = 2 \sum_a^{N/2} C_{\mu a} C_{\nu a}^* . \quad (3.15)$$

Os elementos da matriz de Fock são obtidos ao inserimos a Eq. 3.6 na Eq. 3.12 e usarmos as Eqs. 3.9 e 3.15; após essa álgebra, seus elementos ficam dados como $F_{\mu\nu} = T_{\mu\nu} + G_{\mu\nu}$, onde as contribuições cinética e Coulombiana são respectivamente dadas por

$$\begin{aligned} T_{\mu\nu} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3\mathbf{r} \phi_\mu^*(\mathbf{r}) [\nabla^2 \phi_\nu(\mathbf{r})] , \\ G_{\mu\nu} &= \frac{e^2}{\varepsilon} \sum_\lambda \sum_\sigma P_{\lambda\sigma} \left[\int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \phi_\mu^*(\mathbf{r}_1) \phi_\sigma^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_\nu(\mathbf{r}_1) \phi_\lambda(\mathbf{r}_2) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \phi_\mu^*(\mathbf{r}_1) \phi_\sigma^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_\lambda(\mathbf{r}_1) \phi_\nu(\mathbf{r}_2) \right] . \end{aligned} \quad (3.16)$$

A autoconsistência reside agora no fato de a matriz \mathbf{F} depender de \mathbf{P} , que, por sua vez, depende de \mathbf{C} , que são as incógnitas a serem determinadas.

O procedimento para a solução da Eq. 3.10 deve ser claro. Dado um potencial confinante do sistema, especificamos o número de elétrons N e a base $\{\phi_\mu\}$; calculamos as integrais em $S_{\mu\nu}$, $T_{\mu\nu}$ e $G_{\mu\nu}$; usamos uma tentativa inicial na matriz densidade \mathbf{P} e, com ela e com as integrais de 2 elétrons, obtemos a matriz \mathbf{G} , que somamos com a matriz de 1 elétron \mathbf{T} (a qual é calculada apenas uma vez por não depender de \mathbf{P} ou \mathbf{C}) para formar \mathbf{F} ; diagonalizamos \mathbf{F} para obter \mathbf{C} e ε e usamos essa solução para formar uma nova matriz \mathbf{P} a partir da Eq. 3.15; se esta for igual a matriz tentativa inicial a solução foi obtida; caso contrário, repetem-se os passos anteriores até que a convergência desejada seja alcançada. O critério de convergência também pode ser a energia do estado fundamental calculada em cada iteração, que é reescrita através das Eqs. 3.7 e 3.8 como

$$E_0^{HFR} = \sum_a^{N/2} (h_{aa} + \varepsilon_a) , \quad (3.17)$$

o que na formulação matricial de Roothaan para camadas fechadas se torna

$$E_0^{HFR} = \frac{1}{2} \sum_\mu \sum_\nu P_{\nu\mu} (T_{\mu\nu} + F_{\mu\nu}) . \quad (3.18)$$

3.3 Formalismo Irrestrito de Pople-Nesbet

Um relaxamento da suposição anterior consiste em não mais assumir que as funções de *spin* α e β sejam restritas a terem a mesma função espacial, o que corresponde ao chamado método Hartree-Fock Irrestrito ([109]). Ou seja, assume-se agora $\chi_i(\mathbf{x}) = \left\{ \psi_j^\alpha(\mathbf{r})\alpha(\omega), \psi_j^\beta(\mathbf{r})\beta(\omega) \right\}$, em que os elétrons de *spin* α (β) são descritos pelos orbitais espaciais $\{\psi_j^\alpha | j = 1 \dots k\}$ ($\{\psi_j^\beta | j = 1 \dots k\}$). Funções de onda irrestritas têm assim a forma $|\Psi^{HFI}\rangle = |\psi_1^\alpha \bar{\psi}_1^\beta \dots\rangle$, a qual representa sistemas de camada aberta já que aqui não se exige que cada orbital espacial seja duplamente ocupado, e as funções irrestritas deixam de ser necessariamente auto-estados de L e S ; além disso, N não se restringe mais a um número par, devendo satisfazer apenas a condição $N = N^\alpha + N^\beta$, a soma dos elétrons com *spins up* e *down*.

Elimina-se a dependência em *spin* no formalismo HFI de forma totalmente análoga ao caso HFR. A diferença é que agora $\varepsilon_j^\alpha \neq \varepsilon_j^\beta$, pois $\psi_j^\alpha \neq \psi_j^\beta$, de forma que teremos sempre duas equações a serem simultaneamente resolvidas em toda a abordagem. Em vez da Eq. 3.2, as equações integro-diferenciais de Hartree-Fock acopladas agora são

$$f^{\alpha/\beta} \left| \psi_j^{\alpha/\beta} \right\rangle = \varepsilon_j^{\alpha/\beta} \left| \psi_j^{\alpha/\beta} \right\rangle, \quad (3.19)$$

em que os distintos operadores de Fock de camada aberta são dados por

$$f^{\alpha/\beta} = h_j + \sum_a^{N^{\alpha/\beta}} [J_a^{\alpha/\beta} - K_a^{\alpha/\beta}] + \sum_a^{N^{\beta/\alpha}} J_a^{\beta/\alpha}; \quad (3.20)$$

note que essa expressão recai na Eq. 3.6 se $\psi_j^\alpha = \psi_j^\beta$. Suas contribuições cinética, direta e de troca em um sistema de camadas abertas são dadas por

$$\begin{aligned} h_j \left| \psi_j^{\alpha/\beta} \right\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \left| \psi_j^{\alpha/\beta} \right\rangle, \\ J_a^{\alpha/\beta} \left| \psi_j^{\alpha/\beta} \right\rangle &= \left[\int d^3\mathbf{r}_2 \psi_a^{\alpha/\beta*}(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_a^{\alpha/\beta}(\mathbf{r}_2) \right] \left| \psi_j^{\alpha/\beta} \right\rangle, \\ J_a^{\beta/\alpha} \left| \psi_j^{\alpha/\beta} \right\rangle &= \left[\int d^3\mathbf{r}_2 \psi_a^{\beta/\alpha*}(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_a^{\beta/\alpha}(\mathbf{r}_2) \right] \left| \psi_j^{\alpha/\beta} \right\rangle, \\ K_a^{\alpha/\beta} \left| \psi_j^{\alpha/\beta} \right\rangle &= \left[\int d^3\mathbf{r}_2 \psi_a^{\alpha/\beta*}(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_j^{\alpha/\beta}(\mathbf{r}_2) \right] \left| \psi_a^{\alpha/\beta} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Note que tanto em f^α como em f^β há a contribuição de um termo cinético, de uma interação

direta e outra de troca entre elétrons de mesmos *spins*, e de mais uma interação direta entre elétrons de *spins* opostos; é essa inter-dependência entre f^α e ψ_j^β , assim como entre f^β e ψ_j^α , que torna necessária a solução simultânea da Eq. 3.19. Essa solução fornece os conjuntos $\{\psi_j^\alpha\}$ e $\{\psi_j^\beta\}$ que minimizam a energia do estado fundamental irrestrito $|\Psi_0^{HFI}\rangle$, que é dada por

$$E_0^{HFI} = \sum_a^{N^\alpha} h_{aa}^\alpha + \sum_a^{N^\beta} h_{aa}^\beta + \frac{1}{2} \sum_a^{N^\alpha} \sum_b^{N^\alpha} [J_{ab}^{\alpha\alpha} - K_{ab}^{\alpha\alpha}] + \frac{1}{2} \sum_a^{N^\beta} \sum_b^{N^\beta} [J_{ab}^{\beta\beta} - K_{ab}^{\beta\beta}] + \sum_a^{N^\alpha} \sum_b^{N^\beta} J_{ab}^{\alpha\beta}, \quad (3.22)$$

enquanto as energias dos orbitais espaciais irrestritos são dadas por

$$\varepsilon_i^{\alpha/\beta} = h_{ii}^{\alpha/\beta} + \sum_a^{N^{\alpha/\beta}} [J_{ia}^{\alpha\alpha/\beta\beta} - K_{ia}^{\alpha\alpha/\beta\beta}] + \sum_a^{N^{\beta/\alpha}} J_{ia}^{\alpha\beta/\beta\alpha}, \quad (3.23)$$

de onde também notamos que $E_0^{HFI} \neq \left(\sum_a^{N^\alpha} \varepsilon_a^\alpha + \sum_a^{N^\beta} \varepsilon_a^\beta \right)$. As integrais pertinentes presentes em E_0^{HFI} , ε_i^α e ε_i^β são definidas por $h_{ii}^{\alpha/\beta} = \langle \psi_i^{\alpha/\beta} | h | \psi_i^{\alpha/\beta} \rangle$ para a energia cinética, $J_{ij}^{\alpha\beta} = \langle \psi_i^\alpha | J_j^\beta | \psi_j^\alpha \rangle = \langle \psi_j^\beta | J_i^\alpha | \psi_j^\beta \rangle = J_{ji}^{\beta\alpha}$ para a interação direta entre elétrons de *spins* opostos, $J_{ij}^{\alpha\alpha} = \langle \psi_i^\alpha | J_j^\alpha | \psi_j^\alpha \rangle = \langle \psi_j^\alpha | J_i^\alpha | \psi_j^\alpha \rangle = J_{ji}^{\alpha\alpha}$ para a interação direta entre elétrons de mesmos *spins*, com uma definição semelhante para $J_{ij}^{\beta\beta}$, e $K_{ij}^{\alpha\alpha} = \langle \psi_i^\alpha | K_j^\alpha | \psi_j^\alpha \rangle = \langle \psi_j^\alpha | K_i^\alpha | \psi_j^\alpha \rangle = K_{ji}^{\alpha\alpha}$ para a interação de troca entre elétrons de mesmos *spins*, com uma definição semelhante para $K_{ij}^{\beta\beta}$; não há um termo $K_{ij}^{\alpha\beta} = K_{ji}^{\beta\alpha}$ para a interação de troca entre elétrons de *spins* opostos, pois tal interação não existe. Expressões explícitas para cada uma dessas integrais podem ser obtidas diretamente a partir da Eq. 3.21. Como esperado, as Eqs. 3.22 e 3.23 recaem nas Eqs. 3.7 e 3.8 se $\psi_j^\alpha = \psi_j^\beta$.

A abordagem de Pople-Nesbet ([109]) consiste em se reescrever essas equações irrestritas para camadas abertas em uma forma matricial, de uma maneira análoga à abordagem de Roothaan, a diferença sendo que aqui teremos duas expansões distintas em vez de apenas uma como na Eq. 3.9, uma para cada tipo de orbital espacial; assim, devemos determinar agora dois conjuntos de coeficientes através da solução simultânea de duas equações matriciais acopladas. O procedimento é o mesmo. As expansões

$$\psi_i^{\alpha/\beta} = \sum_\nu C_{\nu i}^{\alpha/\beta} \phi_\nu, \quad (3.24)$$

com $\{\phi_\nu | \nu = 1 \dots k\}$, quando inseridas na Eq. 3.19 e multiplicadas à esquerda por $\phi_\mu^*(\mathbf{r})$, fornecem

as duas equações matriciais $k \times k$ acopladas características do método de Pople-Nesbet,

$$\mathbf{F}^{\alpha/\beta} \mathbf{C}^{\alpha/\beta} = \mathbf{S} \mathbf{C}^{\alpha/\beta} \boldsymbol{\epsilon}^{\alpha/\beta} , \quad (3.25)$$

onde os elementos da matriz de overlap \mathbf{S} são os mesmos dados na Eq. 3.11, e os significados de $\mathbf{C}^{\alpha/\beta}$, $\boldsymbol{\epsilon}^{\alpha/\beta}$, e $\mathbf{F}^{\alpha/\beta}$ se subentendem da discussão que segue aquela equação. Os respectivos elementos das matrizes de Fock são agora

$$F_{\mu\nu}^{\alpha/\beta} = \int d^3\mathbf{r} \phi_{\mu}^*(\mathbf{r}) f^{\alpha/\beta} \phi_{\nu}(\mathbf{r}) . \quad (3.26)$$

É conveniente introduzirmos também nessa abordagem irrestrita os conceitos de densidade de carga e matriz densidade, conforme feito no caso restrito. As densidades de carga de elétrons com *spins up* e *down* são

$$\rho^{\alpha/\beta}(\mathbf{r}) = \sum_a^{N^{\alpha/\beta}} \left| \psi_a^{\alpha/\beta}(\mathbf{r}) \right|^2 , \quad (3.27)$$

com as quais definimos duas novas quantidades,

$$\begin{aligned} \rho^T(\mathbf{r}) &= \rho^{\alpha}(\mathbf{r}) + \rho^{\beta}(\mathbf{r}) , \\ \rho^S(\mathbf{r}) &= \rho^{\alpha}(\mathbf{r}) - \rho^{\beta}(\mathbf{r}) ; \end{aligned} \quad (3.28)$$

$\rho^T(\mathbf{r})$ é a densidade de carga total, cuja integral em todo o espaço fornece N , enquanto $\rho^S(\mathbf{r})$ é a densidade de *spin*, cuja integral em todo o espaço fornece $2M_S$, mostrando que as funções de onda irrestritas são autofunções de S_Z , embora não necessariamente de S^2 . Inserindo-se as expansões da Eq. 3.24 nas respectivas densidades da Eq. 3.27 encontramos

$$\rho^{\alpha/\beta}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} \sum_{\nu} P_{\mu\nu}^{\alpha/\beta} \phi_{\mu}(\mathbf{r}) \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}) , \quad (3.29)$$

em que definimos as matrizes densidade \mathbf{P}^{α} e \mathbf{P}^{β} , cujos elementos são

$$P_{\mu\nu}^{\alpha/\beta} = \sum_a^{N^{\alpha/\beta}} C_{\mu a}^{\alpha/\beta} C_{\nu a}^{\alpha/\beta*} ; \quad (3.30)$$

com elas também definimos duas novas quantidades, as matrizes densidade total e de *spin*,

respectivamente dadas por

$$\begin{aligned}\mathbf{P}^T &= \mathbf{P}^\alpha + \mathbf{P}^\beta, \\ \mathbf{P}^S &= \mathbf{P}^\alpha - \mathbf{P}^\beta.\end{aligned}\quad (3.31)$$

Os elementos das duas matrizes de Fock são obtidos ao inserirmos a Eq. 3.20 na Eq. 3.26 e usarmos as Eqs. 3.24 e 3.30, o que nos fornece $F_{\mu\nu}^{\alpha/\beta} = T_{\mu\nu} + G_{\mu\nu}^{\alpha/\beta}$, sendo que $T_{\mu\nu}$ é o mesmo dado na Eq. 3.16, e agora

$$\begin{aligned}G_{\mu\nu}^{\alpha/\beta} &= \frac{e^2}{\varepsilon} \sum_{\lambda} \sum_{\sigma} \left[P_{\lambda\sigma}^T \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \phi_{\mu}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{\sigma}^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_{\nu}(\mathbf{r}_1) \phi_{\lambda}(\mathbf{r}_2) \right. \\ &\quad \left. - P_{\lambda\sigma}^{\alpha/\beta} \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \phi_{\mu}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{\sigma}^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \phi_{\lambda}(\mathbf{r}_1) \phi_{\nu}(\mathbf{r}_2) \right];\end{aligned}\quad (3.32)$$

a autoconsistência novamente está no fato de ambas as matrizes \mathbf{F} dependerem das matrizes \mathbf{P} , que por sua vez dependem das matrizes \mathbf{C} ; já o acoplamento das equações reside no fato de \mathbf{F}^α depender de \mathbf{P}^β através de \mathbf{P}^T , similarmente como \mathbf{F}^β depende de \mathbf{P}^α .

O procedimento para a solução da Eq. 3.25 é o mesmo usado na Eq. 3.10, tendo em mente que agora uma solução simultânea deve ser encontrada para os dois orbitais espaciais distintos. Se o critério de convergência escolhido for a energia do estado fundamental E_0^{HFI} , das Eqs. 3.22 e 3.23 ela se escreve como

$$E_0^{HFI} = \frac{1}{2} \left[\sum_a^{N^\alpha} (h_{aa}^\alpha + \varepsilon_a^\alpha) + \sum_a^{N^\beta} (h_{aa}^\beta + \varepsilon_a^\beta) \right], \quad (3.33)$$

que na formulação matricial de Pople-Nesbet para camadas abertas se torna

$$E_0^{HFI} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\nu} [P_{\nu\mu}^T T_{\mu\nu} + P_{\nu\mu}^\alpha F_{\mu\nu}^\alpha + P_{\nu\mu}^\beta F_{\mu\nu}^\beta]. \quad (3.34)$$

Como já mencionado, uma desvantagem dessa abordagem é que funções irrestritas, em geral, não são auto-estados do *spin* total S do sistema, embora certamente possuam valores definidos de S_Z . No entanto, podemos usar as expressões ([109])

$$\langle S^2 \rangle_{HFI} = \left(\frac{N^\alpha - N^\beta}{2} \right) \left(\frac{N^\alpha - N^\beta}{2} + 1 \right) + N^\beta - \sum_a^{N^\alpha} \sum_b^{N^\beta} \left[\sum_{\mu} \sum_{\nu} C_{\mu a}^{\alpha*} C_{\nu b}^{\beta} S_{\mu\nu} \right]^2, \quad (3.35)$$

$$\langle S_Z \rangle_{HFI} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\nu} (P_{\nu\mu}^{\alpha} - P_{\nu\mu}^{\beta}) S_{\mu\nu} , \quad (3.36)$$

para determinarmos S_Z e obtermos estimativas de S ; em geral, o valor esperado de S será maior por causa da contaminação oriunda de outras simetrias.

3.4 Aplicação: ponto quântico esférico com 40 elétrons

Aplicamos ambas as abordagens matriciais no mesmo sistema do capítulo anterior, um ponto quântico confinado por um potencial esférico infinito na presença de um campo magnético B_0 , mas agora populado por até 40 elétrons e sem restrições acerca da intensidade do campo. Levamos em conta nas Eqs. 3.9 e 3.24 os orbitais que definem as 6 primeiras camadas de energia dessa simetria - $1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p$ ($[103]$) - ou seja, o índice $\nu \equiv n, l, m_l$ toma os 40 valores possíveis nessas 6 camadas (20 *up* e 20 *down*); já para a interação Coulombiana usamos a mesma expansão da Eq. 2.19, mantendo-se válidos os comentários sobre a parte angular do problema feitos após essa equação. O Hamiltoniano de 1-partícula é o mesmo dado na Eq. 2.25; em unidades de E_0 ele fica

$$H = \frac{1}{\tilde{m}} \frac{a_0^2}{R_0^2} \left[-\frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\mathbf{L}^2}{x^2} + \frac{R_0^2}{2l_B^2} (l_z + \tilde{m} g s_z) + \frac{R_0^4}{4l_B^4} x^2 \text{sen}^2(\theta) \right] , \quad (3.37)$$

enquanto o Hamiltoniano Coulombiano fica, nas mesmas unidades, dado por $H_{ee} = (2/\varepsilon)(a_0/R_0) 1/|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$, com $\mathbf{x} = \mathbf{r}/R_0$. A parte angular, em \mathbf{L}^2 e em $\text{sen}^2(\theta)$, é feita analiticamente (veja discussão após a Eq. 2.19) e então inserida no programa numérico que lida apenas com a parte radial do problema.

Um detalhe importante é que, por causa da inclusão do campo magnético, os formalismos matriciais têm de ser levemente alterados. Na abordagem de Roothaan, o termo quadrático no campo deve ser adicionado à contribuição de partícula única h_a da Eq. 3.4, e daí ele também deve ser somado à definição de $T_{\mu\nu}$ da Eq. 3.16; já os termos lineares no campo, em um sistema de camadas fechadas, se anulam. Na abordagem de Pople-Nesbet, onde tal anulação não ocorre por ela lidar com problemas de camada aberta, os 3 termos em que o campo magnético está presente devem ser adicionados à h_a ; o termo linear $\sim B_0 l_z$, assim como o termo quadrático, entram diretamente nas definições de h_a e de $T_{\mu\nu}$; porém, ao somarmos

em h_a o termo linear dependente de $spin \sim B_0 s_z$, ele fará com que a matriz cinética $T_{\mu\nu}$ seja decomposta em componentes $T_{\mu\nu}^{\alpha/\beta}$, assim como ocorre com $G_{\mu\nu}^{\alpha/\beta}$ na Eq. 3.32. Por causa disso, na presença de um campo magnético, devemos fazer na energia do sistema dada pela Eq. 3.34 a substituição $P_{\nu\mu}^T T_{\mu\nu} = P_{\nu\mu}^\alpha T_{\mu\nu}^\alpha + P_{\nu\mu}^\beta T_{\mu\nu}^\beta$.

Outro detalhe é acerca da base de orbitais $\{\phi_\nu | \nu = 1 \dots k\}$ usada nos cálculos. Em vez de funções de Bessel esféricas, a parte radial de cada um deles é decomposta em uma soma de 5 gaussianas confinadas em um raio R_0 , enquanto mantemos sua parte angular como definida pela simetria do orbital. Ou seja, tomamos na Eq. 2.16

$$\varphi_{n,l,m_l}(x, \theta, \phi) = N_{nl} (1-x)^n x^l \prod_{i=1}^{n-1} (\tilde{\alpha}_{il} - x) \sum_{k=1}^5 V_k e^{-D_k R_0^2 x^2} Y_{l,m_l}(\theta, \phi), \quad (3.38)$$

em que N_{nl} é a normalização do orbital, o polinômio em $(1-x)$ anula a função no contorno $r = R_0$, o polinômio em x anula as funções com $l > 0$ na origem, o produto em $(\tilde{\alpha}_{il} - x)$ anula a função nos zeros $\tilde{\alpha}_{il}$ da respectiva função de Bessel transposta para o intervalo $0 \leq x \leq 1$, e o último somatório leva em conta uma expansão em 5 gaussianas. Seus coeficientes V_k e seus expoentes D_k são determinados para cada distinto valor de R_0 , e são obtidos com a condição ([110]) de se maximizar a sobreposição entre a parte radial da Eq. 3.38 e a respectiva função de Bessel esférica da Eq. 2.16.

Duas últimas expressões que usamos na descrição dos resultados a seguir se relacionam ao potencial químico μ_{PQ} do PQ e à sua energia de carregamento $E_{car} = e^2/C(N)$. O potencial químico expressa a diferença entre duas energias fundamentais sucessivas,

$$\mu_{PQ} = E_0(N) - E_0(N-1), \quad (3.39)$$

enquanto a energia de carregamento é dada ([51], [67]) pela diferença entre o potencial de ionização, $I(N) = E_0(N-1) - E_0(N)$, e a afinidade eletrônica, $A(N) = E_0(N) - E_0(N+1)$, da ilha. Da Eq. 3.39 vemos que $I(N) - A(N) = \mu_{PQ}(N+1) - \mu_{PQ}(N)$, ou então

$$E_{car} = I(N) - A(N) = E_0(N+1) - 2E_0(N) + E_0(N-1); \quad (3.40)$$

se estivéssemos no presente capítulo interessados na corrente eletrônica, E_{car} equivaleria a distância entre picos vizinhos na condutância do sistema.

3.5 Resultados

Mostramos na Fig. 3.1 uma comparação entre os orbitais exatos descritos pelas funções de Bessel esféricas (Eq. 2.16) e as expansões envolvendo 5 gaussianas (Eq. 3.38) usadas em nossos cálculos; isso é feito para uma ilha de GaAs com 2 elétrons e raio de 100 Å. No Painel direito (esquerdo) se encontram as funções de onda (as densidades de probabilidade) desses orbitais. O acordo só não é razoável para orbitais do tipo *s* próximos à origem, embora suas densidades de probabilidade sejam razoáveis. O mesmo ocorre em quaisquer outros raios e ocupações, e também em ilhas de InSb. Na Tab. III.1 mostramos os coeficientes e expoentes otimizados das

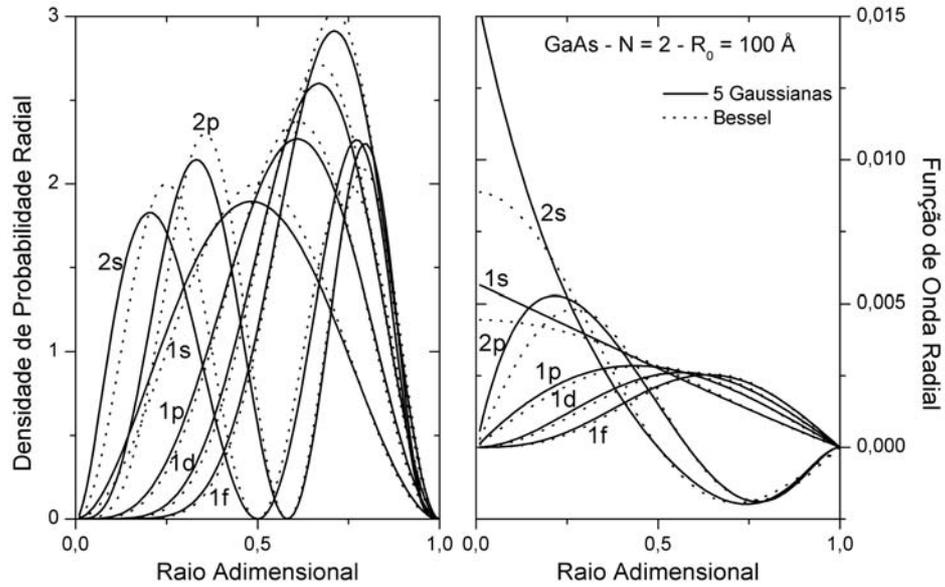


Figura 3.1: Comparação entre as bases expandidas em gaussianas usadas em nossos cálculos e as respectivas funções de Bessel esféricas exatas. No Painel esquerdo encontram-se as densidades de probabilidade, enquanto no Painel direito estão mostradas as funções de onda. O acordo só não é razoável para orbitais do tipo *s* próximos à origem.

5 gaussianas relativas aos 6 orbitais considerados. O fator 10^{-4} em todos os expoentes cancela a presença do termo R_0^2 na Eq. 3.38. Ambos os orbitais com $n = 2$ tem todos os seus expoentes negativos por causa das regiões em que essas funções têm valor negativo.

A Fig. 3.2 mostra resultados de um cálculo HFR. No Painel esquerdo encontram-se as energias dos estados fundamentais em função do raio de uma ilha de GaAs populada por 2, 8, e 18 elétrons; no Painel direito fazemos o mesmo para uma ilha de InSb populada por 2,

Tabela III.1: Valores dos 5 coeficientes e expoentes que otimizam as gaussianas com as quais os 6 orbitais da Fig. 3.1 foram calculados.

<i>orb.</i>	$V_1, D_1(10^{-4})$	$V_2, D_2(10^{-4})$	$V_3, D_3(10^{-4})$	$V_4, D_4(10^{-4})$	$V_5, D_5(10^{-4})$
1s	0,3229, 0,003	0,2353, 0,328	0,4554, 0,043	0,9069, 0,330	0,8317, 0,006
1p	0,5902, 0,762	0,0646, 0,564	0,5941, 0,447	0,4599, 0,350	0,9727, 0,724
1d	0,7301, 1,120	0,9570, 0,915	0,8227, 1,620	0,1950, 0,492	0,4194, 1,100
2s	0,4823, -2,260	0,9875, -2,440	0,1082, -1,530	0,4006, -2,840	0,0342, -2,260
1f	0,6377, 1,500	0,4539, 1,920	0,9730, 1,440	0,4921, 1,610	0,5498, 1,360
2p	0,8513, -1,420	0,0413, -3,720	0,0565, -0,401	0,8797, -1,410	0,0457, -1,700

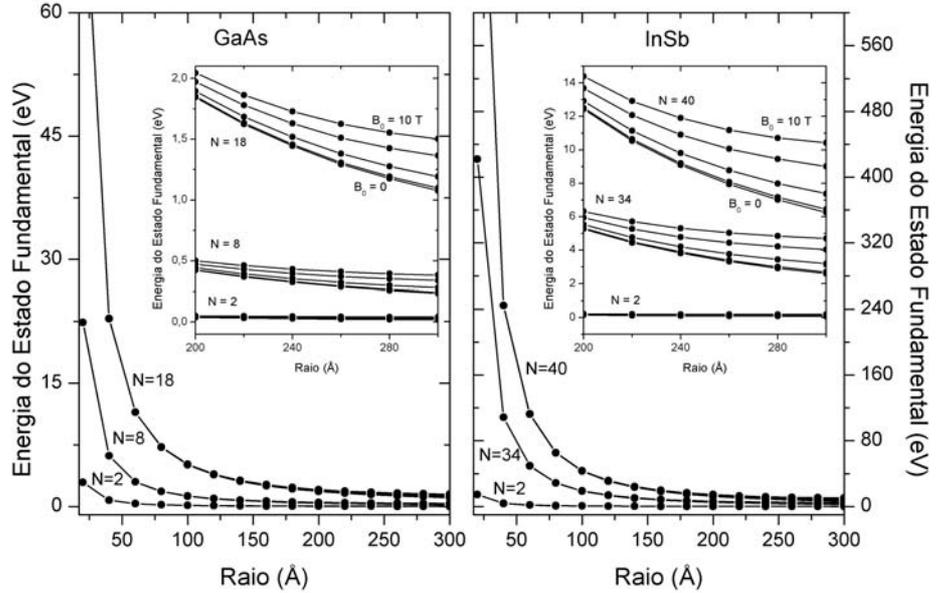


Figura 3.2: Energias restritas de estados fundamentais de uma ilha esférica de GaAs (InSb) populada por $N = 2, 8,$ e 18 ($N = 2, 34,$ e 40) elétrons. A contribuição Coulombiana é mais importante em maiores raios. Nos *insets*, analisamos a influência do campo magnético no sistema. Veja que mesmo nessas configurações de camadas fechadas, onde $L = S = 0$, a presença do campo se faz sentir por causa do termo quadrático em B_0 .

34, e 40 elétrons. Em raios pequenos, a energia cinética é muito alta e domina totalmente a Coulombiana, de forma que as energias relativas à diferentes valores de N são muito afastadas entre si. Em raios maiores, onde a interação elétron-elétron se torna mais importante, as energias relativas a distintos N ficam mais próximas. Nos *insets* dessa figura mostramos um *zoom* nas regiões de raios maiores, e analisamos a influência do campo magnético no sistema. Em ambas as ocupações N desses *insets*, as curvas, em ordem crescente de energia, referem-se a campos de 0, 2, 5, 8, e 10 T , embora na figura isso esteja indicado apenas para $N = 18$ e $N = 40$; para $N = 2$ a escala do gráfico torna imperceptível a presença do campo B_0 . Como esperado, o *splitting* Zeeman é bem maior para a ilha de InSb por causa de seu maior fator g . Porém, o mais interessante a ser notado é que, mesmo nessas configurações de camadas fechadas (onde $L = S = 0$), a influência do termo quadrático em B_0 da Eq. 3.37 se faz presente, principalmente em maiores raios e ocupações da ilha; note que um campo de 2 T não produz diferença apreciável, mas campos maiores ($\sim 5 T$) sim.

Para estudarmos espectros em qualquer ocupação da ilha, mostramos na Fig. 3.3 os resultados de um cálculo HFI, na ausência de campo magnético, de um PQ esférico de GaAs com $R_0 = 100 \text{ \AA}$. No Painel superior esquerdo fazemos uma comparação dos resultados HFI com o caso de elétrons não-interagentes, onde o esquema de camadas de energia é visível em $N = 2, 8, 18, 20, 34$, e 40. Note que a interação elétron-elétron faz com que a energia de uma ilha cuja ocupação corresponda a uma camada menos (mais) do que semi-preenchida seja diminuída (aumentada) em relação ao caso não-interagente; quando tal ocupação corresponde a uma ilha com uma camada exatamente semi-preenchida, a energia do sistema interagente é aproximadamente igual à do não-interagente.

No Painel inferior esquerdo da Fig. 3.3 são mostrados o potencial químico da Eq. 3.39 e a energia de carregamento da Eq. 3.40, onde os valores de $E_0(N)$ são obtidos do cálculo irrestrito apresentado no Painel discutido no parágrafo anterior. Note que μ_{PQ} aumenta de forma linear conforme a ocupação aumenta dentro de uma dada camada. Quando essa camada é totalmente preenchida, há uma mudança abrupta em μ_{PQ} indicando que a camada seguinte de energia começa a ser ocupada; tal mudança é tanto mais abrupta quanto maior for a ocupação da ilha. Um comportamento anômalo parece ocorrer com a camada $2s$, cujo potencial químico é maior do que o da camada $1f$ (que possui maior energia). A energia de carregamento é não só uma outra forma de se verificar a presença de camadas de energia no espectro, como também de se

verificar a validade da regra de Hund ([104]) para o preenchimento dessas camadas. E_{car} deve, em princípio, apresentar picos maiores quando da ocupação total de uma camada ($N = 2, 8, 18, 20, 34$) e picos menores na semi-ocupação de uma camada ($N = 5, 13, 27, 37$). O primeiro fato se deve à maior dificuldade em se adicionar um elétron a uma ilha com uma camada recém-preenchida (se calculássemos a corrente de tunelamento, isso significaria que o sistema apresentaria regiões de bloqueio de Coulomb intensas à essas energias), enquanto o segundo está ligado à regra de Hund, que estabelece que elétrons devem ser adicionados ao sistema com seus *spins* paralelos, até que se ocupem todos os orbitais possíveis em uma dada camada, fazendo com que a energia de troca assim maximizada diminua a energia total do sistema. Porém, algumas discrepâncias são verificadas em E_{car} ; o pico menor de $N = 27$ ocorre aqui em $N = 26$, enquanto o pico maior de $N = 20$ possui aqui um valor negativo.

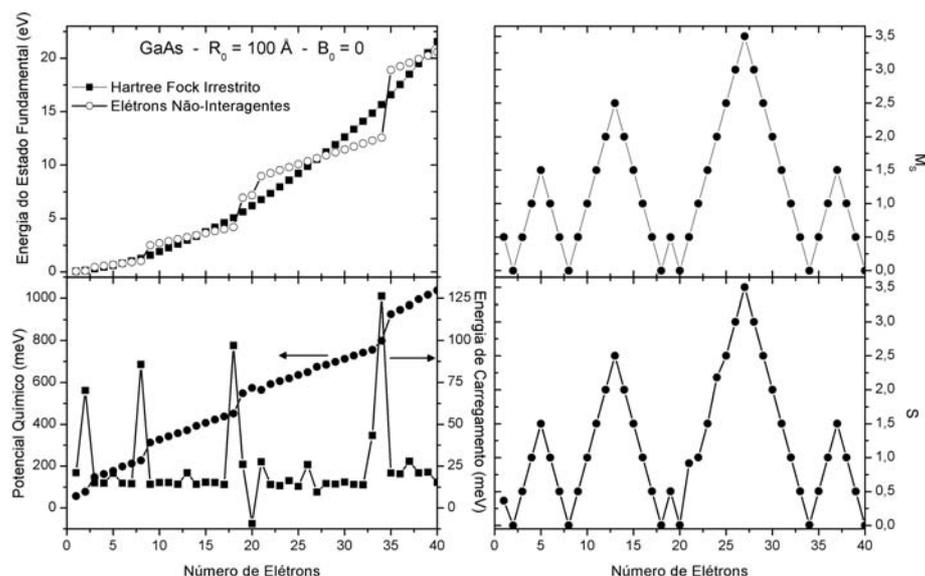


Figura 3.3: Resultados obtidos pelo cálculo irrestrito em uma ilha de GaAs com raio $R_0 = 100$ Å na ausência de campo magnético. O Painel superior esquerdo compara as energias irrestritas com as do sistema não-interagente, onde o esquema de camadas de energia da ilha é visível. O Painel inferior esquerdo mostra o potencial químico e a energia de carregamento da ilha; o primeiro tem mudanças abruptas quando uma nova camada começa a ser preenchida, e a segunda apresenta picos quando a ilha está preenchida totalmente ou pela metade, esse último fato por causa da regra de Hund. Os Painéis inferior e superior direitos mostram, respectivamente, a evolução com N do *spin* total e de sua projeção como fornecidos pelo método irrestrito.

Os Painéis inferior e superior direitos da Fig. 3.3 mostram, respectivamente, a evolução com N do *spin* total S e da sua projeção M_S como calculados a partir das Eqs. 3.35 e 3.36 para as energias irrestritas. Note que, na ausência de campo magnético, a regra de Hund parece ser seguida; o valor de M_S oscila de 0, em uma camada preenchida, até seu máximo ser alcançado em uma camada semi-preenchida, quando então começa a diminuir novamente rumo ao fechamento da camada. Os máximos valem $M_S = 1/2, 3/2, 5/2, \text{ e } 7/2$ para as camadas $s, p, d, \text{ e } f$, respectivamente. O valor esperado de S fornecido pelo formalismo irrestrito também está muito razoável; discrepâncias são observadas apenas em $N = 24$, onde $S > 2$, e em $N = 21$, onde $S > 1/2$. Acreditamos que ambas as discrepâncias relativas ou à camada $2s$ ou à sua vizinhança - μ_{PQ} maior do que o da camada $1f$, pico de $N = 20$ negativo em E_{car} , e valor de S quase dobrado em $N = 21$ - são causadas pela não razoável reprodução gaussiana desse orbital, como visível na Fig. 3.1. Vale também mencionar que os resultados a campo nulo para uma ilha de InSb são qualitativamente semelhantes.

Ilustramos com a Fig. 3.4, para o mesmo PQ de 100 \AA de GaAs da figura anterior, como a presença do campo magnético é capaz de violar a regra de Hund no sistema. Focando na camada $1p$, os Painéis, de cima para baixo e da esquerda para a direita, mostram a sucessão dos estados fundamentais de $N = 3$ a $N = 8$ conforme essa camada é preenchida, assumindo-se que a camada $1s$ mantenha-se populada por um elétron *up* e outro *down*; as distintas populações de *spin* possíveis em cada ocupação são rotuladas por $+$ (*up*) e $-$ (*down*). Em adição ao pequeno efeito Zeeman presente em todas as ocupações, note a mudança do *spin* dos estados fundamentais em $N = 4, 5, \text{ e } 6$ e, comprove que em $B_0 = 0$, a seqüência de *spins* é $1/2 - 1 - 3/2 - 1 - 1/2 - 0$. Já em um campo magnético acima de $3 T$, essa seqüência passa a ser $1/2 - 0 - 1/2 - 0 - 1/2 - 0$, ou seja, o quarteto e os tripletos são suprimidos e o sistema passa a oscilar apenas entre dubletos e singletos em altos campos. Quando a camada está semi-preenchida ($N = 5$), o estado fundamental passa de um quarteto para um dubleto em $B_0 \simeq 2 T$; quando ela tem um elétron à mais ($N = 6$) ou à menos ($N = 4$) do que isso, o estado fundamental passa de um tripleto para um singlete, em ambos os casos, em $B_0 \simeq 3 T$.

Por fim, comparamos os resultados dessas abordagens matriciais com aqueles obtidos via acoplamento **LS** no capítulo anterior (Fig. 2.2) para um PQ de GaAs com $R_0 = 90 \text{ \AA}$. Em campo nulo, lá, as energias são 16.5 meV para $N = 2$, e 34.8 meV para $N = 3$; aqui elas são, respectivamente, 16.1 meV e 33.9 meV ; comprovamos também a validade do negligenciamento

do termo quadrático em B_0 para campos menores do que $2 T$. Vê-se assim que as abordagens de Roothaan e Pople-Nesbet realmente fornecem energias menores do que as obtidas pelo cálculo perturbativo o qual, por sua vez, não fornece resultados tão ruins em tal raio. Repetimos que a desvantagem dos métodos aqui usados é que, no caso irrestrito, em geral não temos informação dos valores de L e S do estado, e nem os estados excitados são confiavelmente obtidos. Por outro lado, a aplicabilidade do acoplamento **LS** para sistemas com alta ocupação é sensivelmente diminuída, além de haver um limite para as intensidades do campo magnético que podem ser consideradas.

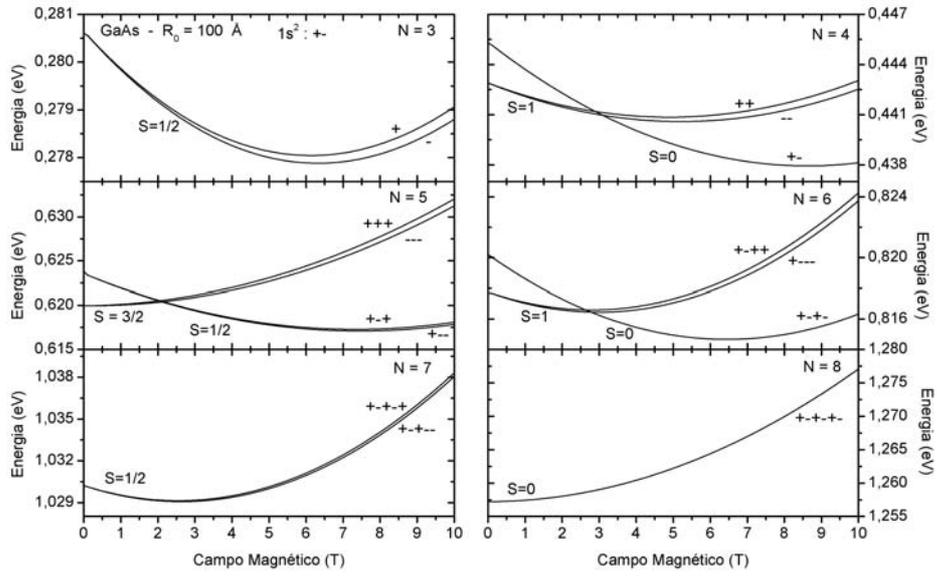


Figura 3.4: Violação da regra de Hund induzida pelo campo magnético no PQ de GaAs com $R_0 = 100 \text{ \AA}$ da figura anterior. Os Painéis mostram a ocupação sucessiva da camada $1p$, assumindo-se que a camada $1s$ mantenha-se populada por um elétron up e outro $down$. As possíveis configurações de $spin$ em cada N são indicadas por $+$ (up) e $-$ ($down$). Em $B_0 = 0$ a seqüência de $spins$ é $1/2 - 1 - 3/2 - 1 - 1/2 - 0$, enquanto em campos maiores do que $3 T$ ela se torna $1/2 - 0 - 1/2 - 0 - 1/2 - 0$.

3.6 Considerações

Em nenhum momento nesse capítulo estivemos interessados em estados excitados, que poderiam, em uma primeira estimativa, ser calculados no método irrestrito promovendo-se elétrons

para os orbitais desocupados da ilha. No entanto, tais estados são melhor obtidos via cálculo de interação de configurações ([109]), que também fornece as contribuições da correlação eletrônica para as energias dos estados fundamentais do sistema. Outro cálculo que se pode ser feito diz respeito às densidades eletrônicas da ilha, conforme aumentamos seu raio; com esse cálculo poderíamos, por exemplo, comprovar ou não a formação de uma molécula de Wigner no PQ quando o sistema atingisse uma determinada baixa densidade crítica. Passamos a tratar no próximo capítulo de pontos quânticos parabólicos, focando principalmente nos efeitos *spin*-órbita em seus espectros.

Capítulo IV

Interação *spin*-órbita em pontos quânticos

Abordamos nesse capítulo a influência de cada um dos tipos de acoplamento *spin*-órbita AIE e AIB possíveis em pontos quânticos parabólicos litograficamente definidos em materiais com estrutura zinblende. Assumimos que apenas a primeira sub-banda de condução do movimento eletrônico, quantizado na direção perpendicular ao GE2D, seja populada, de forma a lidarmos basicamente com uma simetria cilíndrica (circular no plano do GE2D), a qual é tratada em coordenadas polares. Um campo magnético é aplicado perpendicularmente ao plano do GE2D. O PQ assim formado tem como solução analítica o espectro de Fock-Darwin, sobre o qual adicionamos os acoplamentos Rashba e Dresselhaus diagonalizando o Hamiltoniano resultante. Regras de seleção ditando quais níveis do espectro FD anticruzam em um dado campo magnético crítico, onde intensos processos *spin-flip* ocorrem, são derivadas. A base de partícula única é então anti-simetrizada para o trato da interação Coulombiana em uma ilha com 2 elétrons, onde uma mistura singlete-triplete envolvendo seu estado fundamental é verificada. Um importante detalhe acerca do sinal do fator g é também comentado. Em prol de uma leitura mais contínua, redefinimos as quantidades que são necessárias à esse capítulo; alguns símbolos e notações têm aqui um significado diferente daqueles presentes nos capítulos anteriores.

4.1 Espectro Fock-Darwin

Assumimos que o confinamento perpendicular $V(z)$, que define o GE2D onde o PQ é formado, seja forte o suficiente para que os estados eletrônicos sejam completamente localizados na primeira sub-banda de condução do sistema (seja ele um poço quântico ou uma heterojunção), e consideramos que o campo magnético seja aplicado perpendicularmente ao plano do GE2D, ou seja, $\mathbf{B} = B_0\mathbf{z}$; assumimos ainda que o confinamento lateral $V(\rho)$ definindo o PQ seja parabólico, ou seja, $V(\rho) = m\omega_0^2\rho^2/2$, onde m e ω_0 são a massa eletrônica efetiva e a frequência do confinamento, respectivamente. Na ausência de interações SO, o Hamiltoniano H_0 para o PQ cilíndrico assim formado é

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{k}^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2\rho^2 + \frac{g\mu_B}{2}\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} , \quad (4.1)$$

em que $\mathbf{k} = -i\nabla + e\mathbf{A}/(\hbar c)$, o Laplaciano (já sem levar em conta sua parte em z dada por $\partial^2/\partial z^2$) é $\nabla^2 = \rho^{-1}(\partial/\partial\rho(\rho\partial/\partial\rho) + \rho^{-1}\partial^2/\partial\phi^2)$, $\mathbf{A} = B_0\rho(-\sin\phi, \cos\phi, 0)/2$ é o potencial vetorial no *gauge* simétrico, $\mu_B = e\hbar/(2m_0c)$ é o magneton de Bohr onde m_0 é a massa do elétron livre, g é o fator g do *bulk* do material, e $\boldsymbol{\sigma}$ representa as matrizes de Pauli. A solução analítica de H_0 fornece o conhecido espectro de Fock-Darwin ([53], [54], [55]),

$$E_{nl\sigma_z} = (2n + |l| + 1)\hbar\Omega + \frac{l}{2}\hbar\omega_c + g\mu_B B_0 \frac{\sigma_z}{2} , \quad (4.2)$$

onde $\sigma_z = \pm 1$, $n = 0, 1, 2, \dots$ e $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ são, respectivamente, os números quânticos radiais e azimutais, e $\omega_c = eB_0/(mc)$ e $\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2/4}$ são, respectivamente, as frequências ciclotrônica e efetiva do sistema; as escalas de comprimento típicas do PQ são $l_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega_0)}$, $l_B = \sqrt{\hbar/(m\omega_c)}$, e $\lambda = \sqrt{\hbar/(m\Omega)}$, referindo-se respectivamente aos comprimentos de confinamento, magnético, e efetivo do sistema. As autofunções de H_0 são, por sua vez, dadas por

$$\Psi_{nl\sigma_z}(x, \phi, \sigma_z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} R_{nl}(x) e^{il\phi} \chi_{\sigma_z} , \quad (4.3)$$

onde $x = \rho/\lambda$, χ_{σ_z} é a autofunção de *spin*, e as funções radiais

$$R_{nl}(x) = \sqrt{\frac{2n!}{\lambda^2(n+|l|)!}} x^{|l|} e^{-x^2/2} L_n^{|l|}(x^2) \quad (4.4)$$

são dadas em termos dos polinômios associados de Laguerre $L_n^{||}(y)$. É interessante reescrevermos H_0 em unidades de $\hbar\Omega$, o que resulta em

$$H_0 = -\frac{1}{2x} \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{L_z^2}{2x^2} + \frac{x^2}{2} + \frac{\omega_c}{2\Omega} \left(L_z + \frac{g\tilde{m}}{2} \sigma_z \right), \quad (4.5)$$

em que $\tilde{m} = m/m_0$ e $L_z = -i\partial/\partial\phi$.

4.2 Interação *spin*-órbita do tipo Rashba

Por causa da assimetria de inversão estrutural originada não só pelo confinamento perpendicular que dá forma ao GE2D, como também pelo confinamento lateral que define o PQ, o acoplamento SO AIE deve ser adicionado a H_0 para a correta descrição do problema. Seu Hamiltoniano tem a forma

$$H_{AIE} = \alpha \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \mathbf{k}), \quad (4.6)$$

onde $V(\mathbf{r}) = V(\rho) + V(z)$ é o potencial de confinamento total, e α é o parâmetro de acoplamento SO. Podemos separar H_{AIE} em três contribuições (veja Apêndice B) como $H_{AIE} = H_{AIE}^D + H_R + H_K$, onde

$$H_K = i \frac{\alpha \omega_0}{l_0^2 \Omega} \lambda x \langle k_z \rangle (\sigma_+ L_- - \sigma_- L_+) \quad (4.7)$$

se anula porque $\langle k_z \rangle = 0$ com qualquer função que usemos para a primeira sub-banda de condução do sistema,

$$H_{AIE}^D = \frac{\alpha \omega_0}{l_0^2 \Omega} \sigma_z \left[L_z + \frac{\omega_c}{2\Omega} x^2 \right] \quad (4.8)$$

é a contribuição, diagonal na base FD, devida ao confinamento lateral e

$$H_R = -\frac{1}{\hbar\Omega} \frac{\alpha}{\lambda} \frac{dV}{dz} [\sigma_+ L_- A_- + \sigma_- L_+ A_+] \quad (4.9)$$

é o chamado termo Rashba ([69]) induzido pelo confinamento perpendicular. Nestas equações, $L_{\pm} = e^{\pm i\phi}$, $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$ e

$$A_{\pm} = \mp \frac{\partial}{\partial x} + \frac{L_z}{x} + \frac{\omega_c}{2\Omega} x. \quad (4.10)$$

Note que todos os termos estão expressos em unidades de $\hbar\Omega$; os termos não nulos são lineares em k e são, em princípio, externamente ajustáveis: H_{AIE}^D depende da frequência de confinamento ω_0 , enquanto H_R depende do campo elétrico interfacial E_0 (por exemplo, em um poço triangular - $V(z) = -eE_0z$ -, teríamos $dV/dz = -eE_0$).

É interessante mencionar que se o Hamiltoniano total H do problema fosse apenas a soma de $H_0 + H_{AIE}^D$, este teria uma solução analítica ([101]); seu espectro seria o mesmo da Eq. 4.2, desde que substituíssemos Ω por $\Omega_{\sigma_z} = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2/4 + \sigma_z(\alpha/l_0^2)\omega_0\omega_c}$ e adicionássemos a contribuição $\sigma_z l(\alpha/l_0^2)\hbar\omega_0$, e suas funções radiais seriam as mesmas da Eq. 4.4, desde que substituíssemos λ por $\lambda_{\sigma_z} = \sqrt{\hbar/(m\Omega_{\sigma_z})}$, mudando-se também a variável x para ρ/λ_{σ_z} . A inclusão de H_R torna H , certamente, não-diagonal.

4.3 Interação *spin*-órbita do tipo Dresselhaus

Se o PQ é formado em um material com estrutura cristalina zinblende, sua ausência implícita de simetria de inversão *bulk* dá origem ao chamado acoplamento SO AIB, ou termo Dresselhaus, o qual deve também ser adicionado a H_0 para uma descrição apropriada do problema. Seu Hamiltoniano *bulk* tem a forma ([68])

$$H_{AIB} = \gamma [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)] , \quad (4.11)$$

em que γ é o parâmetro de acoplamento SO. Após a quantização originando o GE2D, assumida na direção z , H_{AIB} pode ser separado em três contribuições na forma $H_{AIB} = H_D^L + H_D^Q + H_D^C$, onde $H_D^L = \gamma \langle k_z^2 \rangle [\sigma_y k_y - \sigma_x k_x]$ é linear em k , $H_D^Q = \gamma \sigma_z \langle k_z \rangle (k_x^2 - k_y^2)$ é quadrático em k , e $H_D^C = \gamma [\sigma_x k_x k_y^2 - \sigma_y k_y k_x^2]$ é cúbico em k . É direto notar que o termo quadrático (e diagonal em *spin*),

$$H_D^Q = \frac{1}{\hbar\Omega} \frac{\gamma \langle k_z \rangle}{\lambda^2} \sigma_z [L_+^2 B_+ + L_-^2 B_-] , \quad (4.12)$$

onde definimos

$$B_{\pm} = \left(-\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{x} \pm \frac{\omega_c}{\Omega} x \right) \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} - \left(\pm \frac{2}{x^2} + \frac{L_z}{x^2} + \frac{\omega_c}{\Omega} \right) \frac{L_z}{2} - \frac{\omega_c^2}{8\Omega^2} x^2 , \quad (4.13)$$

corresponde a uma renormalização da massa no plano 2D, a qual passaria assim a depender do *spin* eletrônico e seria diferente nas direções x e y ; porém, tal termo se anula já que novamente

Tabela IV.1: Todos os termos constituintes da Eq. 4.16 que definem a contribuição cúbica para o acoplamento SO do tipo Dresselhaus.

<i>termo</i>	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$
A_{i1}	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$
A_{i2}	$\frac{3}{4}(1 + L_z)$	$\frac{3}{4}(1 - L_z)$	$\frac{1}{4}(1 + L_z)$	$\frac{1}{4}(1 - L_z)$
A_{i3}	$-\frac{3}{4}(1 + 3L_z + L_z^2)$	$-\frac{3}{4}(1 - 3L_z + L_z^2)$	$-\frac{1}{4}(1 - L_z + L_z^2)$	$-\frac{1}{4}(1 + L_z + L_z^2)$
A_{i4}	$\frac{1}{4}(8L_z + 6L_z^2 + L_z^3)$	$\frac{1}{4}(-8L_z + 6L_z^2 - L_z^3)$	$\frac{1}{4}(2L_z^2 - L_z^3)$	$\frac{1}{4}(2L_z^2 + L_z^3)$
B_{i1}	$\frac{3}{8}$	$-\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$	$-\frac{1}{8}$
B_{i2}	$-\frac{3}{8}(1 + 2L_z)$	$-\frac{3}{8}(-1 + 2L_z)$	$-\frac{1}{8}(5 + 2L_z)$	$-\frac{1}{8}(-5 + 2L_z)$
B_{i3}	$\frac{3}{8}(2L_z + L_z^2)$	$\frac{3}{8}(2L_z - L_z^2)$	$-\frac{3}{8}(2L_z + L_z^2)$	$-\frac{3}{8}(2L_z - L_z^2)$
C_{i1}	$-\frac{3}{16}$	$-\frac{3}{16}$	$-\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{16}$
C_{i2}	$\frac{3}{16}L_z$	$-\frac{3}{16}L_z$	$-\frac{1}{16}(8 + 3L_z)$	$-\frac{1}{16}(8 - 3L_z)$
D_{i1}	$\frac{1}{32}$	$-\frac{1}{32}$	$-\frac{1}{32}$	$\frac{1}{32}$

$\langle k_z \rangle = 0$. O termo linear pode ser escrito como

$$H_D^L = -\frac{i}{\hbar\Omega} \frac{\gamma \langle k_z^2 \rangle}{\lambda} [\sigma_+ L_+ A_+ - \sigma_- L_- A_-] , \quad (4.14)$$

onde $\langle k_z^2 \rangle = (\pi/z_0)^2$ se um poço infinito é assumido definindo o GE2D, z_0 sendo a largura (altura) típica do sistema na direção z , e A_{\pm} são dados na Eq. 4.10. Já o termo cúbico pode ser expresso, após alguma álgebra, como

$$H_D^C = \frac{i}{\hbar\Omega} \frac{\gamma}{\lambda^3} \left\{ \sigma_- L_+^3 \left[A_1 + \frac{\omega_c}{\Omega} B_1 + \frac{\omega_c^2}{\Omega^2} C_1 + \frac{\omega_c^3}{\Omega^3} D_1 \right] + \sigma_+ L_-^3 \left[A_2 + \frac{\omega_c}{\Omega} B_2 + \frac{\omega_c^2}{\Omega^2} C_2 + \frac{\omega_c^3}{\Omega^3} D_2 \right] \right. \\ \left. + \sigma_- L_- \left[A_3 + \frac{\omega_c}{\Omega} B_3 + \frac{\omega_c^2}{\Omega^2} C_3 + \frac{\omega_c^3}{\Omega^3} D_3 \right] + \sigma_+ L_+ \left[A_4 + \frac{\omega_c}{\Omega} B_4 + \frac{\omega_c^2}{\Omega^2} C_4 + \frac{\omega_c^3}{\Omega^3} D_4 \right] \right\} , \quad (4.15)$$

onde introduzimos as abreviaturas

$$A_i = A_{i1} \frac{\partial^3}{\partial x^3} + A_{i2} \frac{1}{x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + A_{i3} \frac{1}{x^2} \frac{\partial}{\partial x} + A_{i4} \frac{1}{x^3} , \\ B_i = B_{i1} x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + B_{i2} \frac{\partial}{\partial x} + B_{i3} \frac{1}{x} , \\ C_i = C_{i1} x^2 \frac{\partial}{\partial x} + C_{i2} x , \\ D_i = D_{i1} x^3 , \quad (4.16)$$

com $i = 1, 2, 3, 4$. Cada um dos componentes da Eq. 4.16 é dado na Tab. IV.1; o Apêndice B detalha a dedução dos termos AIB.

Devemos salientar que, em um campo magnético, os elementos matriciais relativos a $\sigma_- L_-$

e $\sigma_+ L_+$ em H_D^C não são Hermitianos, daí resultando a necessidade de simetrizá-los ([81], [82]); se o campo é nulo, tal problema não ocorre ([89]). Observe que o termo Dresselhaus linear também pode, em princípio, ser variado ao mudarmos o valor de z_0 da estrutura. Note que ambas as contribuições AIB também estão escritas em unidades de $\hbar\Omega$.

4.4 Interação elétron-elétron e Hamiltoniano total

Para a inclusão da interação Coulombiana no PQ, expandimos o termo $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1}$ no Hamiltoniano $H_{ee} = e^2/(\varepsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ em termos de funções de Bessel J_m , o que nos permite escrevê-lo, em unidades de $\hbar\Omega$, na forma ([105])

$$H_{ee} = \frac{\lambda}{a_B} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\phi_1 - \phi_2)} \int_0^{\infty} d\xi J_m(\xi x_1) J_m(\xi x_2) e^{-\xi z_0/\lambda}, \quad (4.17)$$

onde ε é a constante dielétrica do material e $a_B = \varepsilon\hbar^2/(me^2)$ é o raio de Bohr efetivo do sistema. Os estados de 2-partículas do PQ são apropriadamente anti-simetrizados ao construirmos determinantes de Slater baseados nas funções FD da Eq. 4.3, de forma que ambas as contribuições Coulombianas, direta e de troca, são incluídas; tais estados podem ser rotulados pelas projeções dos momentos angulares totais orbital (M_L) e de *spin* (M_S). Embora o somatório em m na Eq. 4.17 seja infinito, na prática, ao realizarmos a integração angular de um elemento do tipo $\langle M_L M_S | H_{ee} | M'_L M'_S \rangle$, a qual envolve cálculos de $\langle \Psi_i(1) \Psi_j(2) | H_{ee} | \Psi_k(1) \Psi_l(2) \rangle$, teremos apenas uma única contribuição não nula satisfazendo $\delta_{l_i+l_j, l_k+l_l}$, de forma que os elementos matriciais Coulombianos devem satisfazer δ_{M_L, M'_L} como esperado ([106]); certamente, eles também satisfazem δ_{M_S, M'_S} , já que a interação Coulombiana não depende de *spin*.

Após termos exposto separadamente nas Eqs. 4.5, 4.8, 4.9, 4.14, 4.15, e 4.17 todos os Hamiltonianos incluídos no modelo, vale explicitar que o Hamiltoniano total H de 1-partícula será a soma

$$H = H_0 + H_{AIE}^D + H_R + H_D^L + H_D^C; \quad (4.18)$$

quando estivermos tratando um PQ com 2 partículas, o Hamiltoniano total \tilde{H} será então dado por

$$\tilde{H} = \sum_{i=1}^2 H + H_{ee}. \quad (4.19)$$

4.5 Regras de seleção, campo crítico e sinal do fator g

Antes de mostrarmos os espectros de PQ's parabólicos sob interações SO, a forma com que escrevemos as Eqs. 4.5, 4.8, 4.9, 4.14, 4.15, e 4.17 já nos permite adiantar alguns comentários gerais da influência SO no sistema, principalmente no que se refere às regras de seleção ditando quais níveis no espectro eletrônico irão cruzar ou anticruzar em um dado campo magnético. Observe de imediato que os termos H_{AIE}^D , H_R e H_D^L têm uma dependência linear com o campo magnético, enquanto o termo H_D^C tem dependências linear, quadrática e cúbica com B_0 .

A simetria característica do sistema dita quais níveis de energia $\{n, l, \sigma_z\}$ de H_0 são influenciados pelos termos SO através de regras de seleção explicitadas a seguir; usaremos j para rotular a projeção do momento angular total de partícula única, com $j = l + \sigma_z/2$. Em campo nulo, o termo diagonal H_{AIE}^D levanta a degenerescência do espectro FD do PQ de acordo com o valor de j . Já em campo finito, o termo Rashba H_R induz anticruzamentos no espectro de H_0 sempre que um par de níveis com $\Delta l = \pm 1 = -\Delta\sigma_z/2$ se cruzarem e, por causa dos operadores $\sigma_{\pm}L_{\mp}$, níveis com $l \leq 0$ são os mais afetados já que suas dispersões magnéticas facilitam cruzamentos; o AC de menor energia ocorre entre os níveis $\{0, 0, -1\}$ e $\{0, -1, +1\}$. Também em um campo finito, o termo Dresselhaus cúbico H_D^C , através dos operadores $\sigma_{\mp}L_{\pm}^3$, introduz AC's no espectro FD sempre que um par de níveis com $\Delta l = \mp 3$ e $\Delta\sigma_z/2 = \pm 1$ se cruzarem, sendo que os dois AC's de menor energia envolvem os níveis $\{0, 1, -1\}$ e $\{0, -2, +1\}$, e $\{0, 0, -1\}$ e $\{0, -3, +1\}$. Já o termo Dresselhaus linear H_D^L , mesmo em campo finito, através dos operadores $\sigma_{\pm}L_{\pm}$, não é capaz de induzir AC's no espectro FD, porém levanta degenerescências e provoca deslocamentos de cruzamentos por causa de elementos matriciais com $\Delta l = \pm 1 = \Delta\sigma_z/2$, o mesmo valendo para os operadores $\sigma_{\pm}L_{\pm}$ em H_D^C . Vale ressaltar que elementos matriciais entre estados com diferentes n 's, em geral, não são nulos.

Com relação ao espectro de H_0 puro, em campo nulo suas três camadas menos energéticas contêm, em ordem crescente de energia, os estados $\{0, 0, \pm 1\}$, $\{0, -1, \pm 1\}$ e $\{0, 1, \pm 1\}$, e $\{0, -2, \pm 1\}$, $\{1, 0, \pm 1\}$ e $\{0, 2, \pm 1\}$. A inclusão de efeitos SO faz com a primeira camada tenha $j = 1/2$, a segunda seja subdividida em $j = 1/2$ e $3/2$, e a terceira se divida em $j = 1/2$, $3/2$ e $5/2$; já a presença de um campo magnético levanta as degenerescências orbital e de *spin* dos estados, introduzindo uma competição entre efeitos magnéticos e SO nas energias do PQ.

Por causa do fator g negativo em um PQ de InSb, seu estado fundamental tem $l = 0$ e $\sigma_z = +1$, e o cruzamento de menor energia de H_0 , relativo aos estados $\{0, 0, -1\}$ e $\{0, -1, +1\}$,

ocorre em um campo magnético crítico dado por

$$B_C^0 = \frac{\hbar\omega_0}{\mu_B} \frac{\tilde{m}}{\sqrt{|\tilde{m}|g|(\tilde{m}|g| + 2)}} ; \quad (4.20)$$

como já exposto, a inclusão de H_R faz com que tal cruzamento se torne um AC, abrindo um mini-gap de energia em $B_C \simeq B_C^0$. Note que B_C^0 pode ser diminuído ao reduzirmos a energia de confinamento do PQ. Seu valor moderado no InSb (que adiantamos ser de 2 a 3 T para $\hbar\omega_0 = 15 \text{ meV}$) é uma consequência direta do alto valor do fator g desse material; em um PQ de GaAs, por outro lado, mesmo em um confinamento muito fraco ($\hbar\omega_0 = 2 \text{ meV}$), temos $B_C^0 \simeq 9.5 \text{ T}$, um campo onde os níveis de Landau já estão bem definidos.

Um detalhe interessante a ser discutido diz respeito ao sinal do fator g . Mencionamos que em PQ's com $g < 0$, H_R introduz AC's no espectro enquanto H_D^L desloca cruzamentos e AC's para novos campos críticos. Por outro lado, em PQ's com $g > 0$, a seqüência de níveis é permutada e, conseqüentemente, H_D^L assume o papel de H_R , e vice-versa; para visualizar tal fato, basta verificar que o estado fundamental de H_0 passa a ter $l = 0$ e $\sigma_z = -1$, que seu cruzamento de menor energia passa a ser entre os estados $\{0, 0, +1\}$ e $\{0, -1, -1\}$, e relembrar a forma dos operadores nas Eqs. 4.9 e 4.14. Dessa maneira, em um PQ de silício, por exemplo, que possui $g > 0$ e não tem estrutura zinblende, o Hamiltoniano AIB é ausente, enquanto o Hamiltoniano AIE não é capaz de provocar qualquer AC em seu espectro de energia.

No que se refere a H_{ee} , a interação Coulombiana a campo nulo tem como efeito separar o espectro em singletos e tripletos, enquanto a campo finito a seqüência de estados pode ser alterada; por exemplo, o estado fundamental da ilha passa a oscilar entre singletos e tripletos conforme o campo magnético é aumentado.

4.6 Resultados para um ponto quântico de 1 elétron

Relembramos que a abordagem perturbativa ([90], [91], [92], [93], [94]) realizada em ilhas de GaAs não é válida em materiais de *gap* estreito, que são o foco desse estudo (no caso InSb); por isso, uma diagonalização exata do Hamiltoniano total se faz necessária. Para uma melhor compreensão do espectro de 1-partícula de H total como função de B_0 para um PQ de InSb, optamos em discutir progressivamente as mudanças nos níveis FD de H_0 induzidas pela adição separada de cada um dos 4 termos SO possíveis. Em todas as figuras dessa seção, o Painel A

Tabela IV.2: Parâmetros para o PQ de InSb usados em nossos cálculos. A maneira com que as energias SO foram estimadas está explicada no texto.

E_H (meV)	\tilde{m} (g)	ε	a_B (Å)	α (Å ²)	γ (eVA ³)	$\frac{dV}{dz}$ ($\frac{eV}{\text{Å}}$)
23	0,014 (-51)	16,5	625	500	160	-0,5 10 ⁻³
$\hbar\omega_0$ (meV)	E_{AIE}^D (meV)	E_R (meV)	E_D^C (meV)	E_D^L (meV)	E_{ee} (meV)	$l_0(z_0)$ (Å)
15	0,2	1,3	0,02	5,2	4,5	190 (40)

mostra o espectro de um PQ definido pelos parâmetros da Tab. IV.2 (quando outros valores não forem especificados) obtido de uma diagonalização numérica usando-se estados da base FD com $n \leq 4$ e $|l| \leq 9$ (equivalendo, em campo nulo, a 10 camadas de energia), ou seja, 110 estados da base; o Painel *B* mostra um *zoom* nas três menores camadas de energia, com um *inset* mostrando outro *zoom* nos 4 estados da segunda camada de energia; os Painéis *C* e *D* mostram, respectivamente, a evolução dos números quânticos de *spin* σ_z e orbital l com o campo B_0 para todos os 110 estados da base, enquanto seus *insets* mostram o mesmo, só que levando-se em conta apenas os 7 estados de menor energia do PQ. As estimativas das energias dadas na Tab. IV.2 são retiradas de seus respectivos prefatores a campo nulo, ou seja, $E_{AIE}^D = (\alpha/l_0^2)\hbar\omega_0$, $E_R = (\alpha/\lambda)dV/dz$, $E_D^L = \gamma\langle k_z^2 \rangle/\lambda$, $E_D^C = \gamma/\lambda^3$ e $E_{ee} = (\lambda/a_B)\hbar\Omega$, enquanto os valores de α e γ foram retirados da Ref. [101], embora eles não possam ser tomados como definitivos (por exemplo, a Ref. [96] fornece $\gamma = 220$ eVA³). Observe nessa tabela que E_D^L é comparável a E_{ee} , e que podemos igualar E_R a E_D^L ao quadruplicarmos dV/dz ; certamente, essas energias são distintas para diferentes níveis, e mudam com os parâmetros do modelo assim como com o campo magnético.

4.6.1 Espectro Fock-Darwin puro

Como ponto de partida e referência, mostramos na Fig. 4.1 o espectro de H_0 puro, onde não há qualquer contribuição SO. Note especialmente no Painel *A*: a estrutura de camadas de energia do PQ (as três primeiras mencionadas na seção anterior) a campo nulo, com uma separação de 15 meV entre camadas sucessivas; o levantamento das degenerescências orbital e de *spin* em um campo finito; a presença de degenerescências acidentais a campo finito (note que $B_C^0 \simeq 2.6$ T); a maior dispersão com B_0 dos orbitais tendo $l > 0$; e a formação de níveis de Landau em altos campos magnéticos. Note ainda a sequência de estados do PQ; por exemplo, em $B_0 = 0.5$ T, observe no Painel *B* que os 12 estados de menor energia são, em ordem crescente, $\{0, 0, +1\}$,

$\{0, 0, -1\}$, $\{0, -1, +1\}$, $\{0, -1, -1\}$, $\{0, 1, +1\}$, $\{0, 1, -1\}$, $\{0, -2, +1\}$, $\{0, -2, -1\}$, $\{1, 0, +1\}$, $\{1, 0, -1\}$, $\{0, 2, +1\}$, e $\{0, 2, -1\}$; no *inset* desse painel exemplificamos com a segunda camada que não há qualquer cruzamento de níveis fora dos pontos de degenerescência acidental. Pode-se comprovar que nenhuma mistura de níveis está presente no espectro de H_0 olhando-se a evolução de σ_z e l com o campo B_0 (Painéis *C* e *D* e *insets*); note que todos os 110 estados da base são, de fato, estados puros, já que $\sigma_z = \pm 1$ e $-9 < l < 9$, ambos tomando apenas valores inteiros. Tais características gerais podem ser tomadas como as assinaturas de um confinamento parabólico em PQ's 2D.

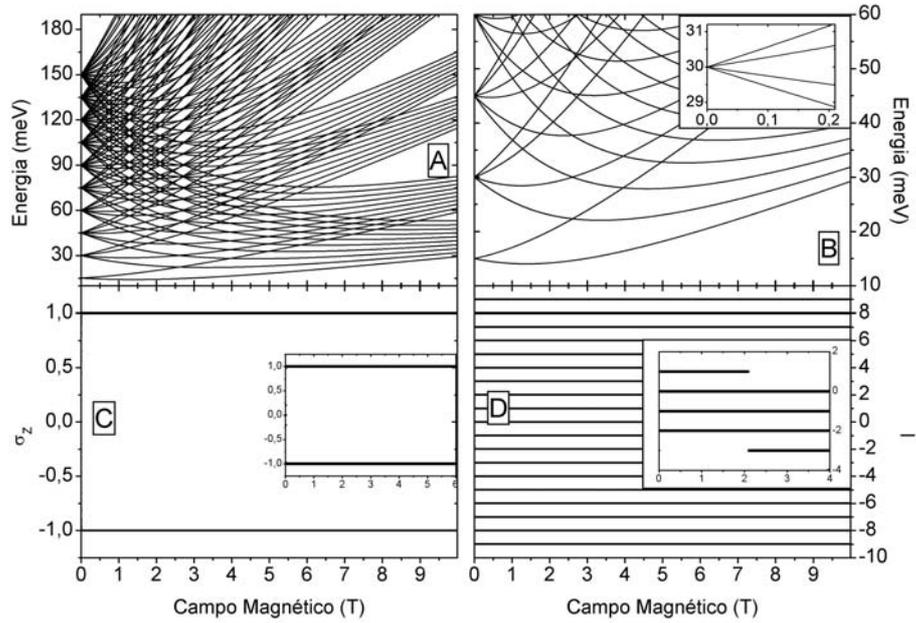


Figura 4.1: Espectro Fock-Darwin de H_0 , sem inclusão de termos SO. Note a estrutura de camadas a campo nulo, assim como a presença de várias degenerescências acidentais a campo finito. Os estados são puros, já que os valores de σ_z e l são sempre os mesmos números inteiros, em qualquer campo. Os significados dos Painéis *A*, *B*, *C* e *D* estão explicados no texto, e são os mesmos para todas as figuras dessa seção.

4.6.2 Efeitos do termo Rashba diagonal

A adição do termo Rashba diagonal H_{AIE}^D a H_0 (Fig. 4.2) causa um pequeno *splitting* do espectro a campo nulo, sem no entanto deslocar consideravelmente as degenerescências acidentais presentes a campo finito; daí, o valor B_C do campo crítico para o primeiro cruzamento de níveis

não é alterado pela inclusão de H_{AIE}^D , ou seja, $B_C = B_C^0 \simeq 2.6 T$ (Painéis A e B). Tal *splitting* induz novos cruzamentos de níveis a baixos campos; no *inset* do Painel B exemplificamos tal fato com a segunda camada de energia. Isso decorre do fato de que H_{AIE}^D ordena estados de acordo com o valor de j , e o estado de maior (menor) energia a campo nulo tem, nessa segunda camada que tomamos como exemplo, $j = 3/2$ ($j = 1/2$). Note que para $B_0 \gtrsim 0.2 T$ o ordenamento normal de estados (aquele existente na ausência de termos SO) para um PQ com $g < 0$ é refeito, ou seja, $\{0, -1, +1\}$, $\{0, -1, -1\}$, $\{0, 1, +1\}$, e $\{0, 1, -1\}$ em ordem crescente de energia; note ainda que o estado $3/2$ ($1/2$), a campo nulo, está acima (abaixo) de $30 meV$. Esta competição entre efeitos *spin*-órbita e de campo magnético externo é idêntica aos regimes Zeeman e Paschen-Back de átomos reais ([102]), e esse mesmo ordenamento de níveis é observado na Ref. [101], em que o termo Rashba H_R não é levado em conta. Os Painéis C e D e seus *insets* comprovam que esse Hamiltoniano SO diagonal não induz qualquer mistura nos estados FD do PQ.

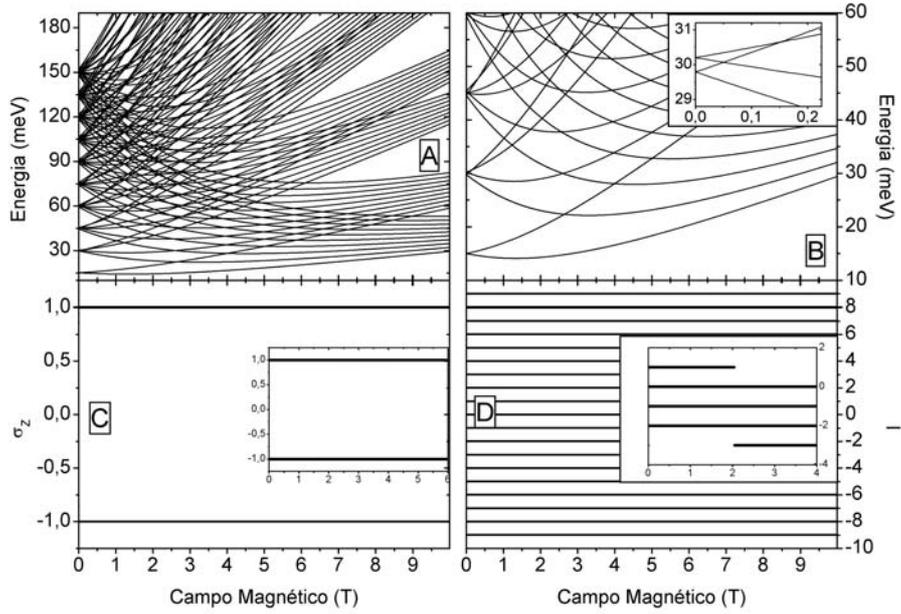


Figura 4.2: Espectro de energia do PQ quando apenas o termo H_{AIE}^D é adicionado a H_0 . Os estados continuam sendo puros a qualquer campo, e novos pontos de degenerescência acidental são induzidos no espectro a baixos campos, os quais definem uma competição entre efeitos SO e magnéticos no espectro da ilha.

4.6.3 Efeitos do termo Rashba não-diagonal

A adição do termo Rashba não-diagonal H_R a H_0 (Fig. 4.3) induz uma forte e intrínseca mistura de estados, qualquer que seja a magnitude de α , sempre que um par de níveis FD com $\Delta l = -\Delta\sigma_z/2 = \pm 1$ se cruzem em uma degenerescência acidental do espectro de H_0 . Essa mistura converte o cruzamento que ocorria em B_C^0 em um AC, abrindo assim um mini-*gap* de energia em $B_C \simeq 2.5 T \simeq B_C^0$ (Painéis *A* e *B*); os Painéis *C* e *D* mostram que níveis de maior energia também satisfazendo essa regra de seleção apresentam AC's aproximadamente no mesmo campo crítico, daí o colapso verificado tanto em σ_z como em l em $B_0 \simeq 2.5 T$. A largura dessa região de campos críticos (entre 2.1 e 2.6 T no Painel *C*), assim como o tamanho dos mini-*gaps* abertos nos AC's é proporcional à magnitude de α , enquanto o próprio valor de B_C é pouco afetado pelos valores de α (*insets* dos Painéis *C* e *D*). Vale mencionar que as demais características gerais são idênticas ao caso anterior, ou seja, H_R também induz um pequeno *splitting* do espectro a campo nulo e desloca apenas levemente degenerescências acidentais a campo finito. Note no *inset* do Painel *B* que a seqüência de estados na segunda camada, a campo nulo, é oposta ao caso anterior: o estado $j = 1/2$ ($j = 3/2$) é o de maior (menor) energia, e agora o primeiro se mantém praticamente no mesmo valor de H_0 (30 meV), enquanto o segundo tem um valor levemente menor. Quando $B_0 \gtrsim 0.1 T$ o ordenamento normal de estados é novamente refeito. Note por fim no Painel *D* que todo estado tendo l par e negativo ($l = -2, -4, -6, -8$) anticruza.

4.6.4 Inclusão simultânea de ambos os termos Rashba

A Fig. 4.4 mostra a adição simultânea de ambos os termos AIE, H_{AIE}^D e H_R , a H_0 . Observe no *inset* do Painel *B* que o ordenamento dos estados é aquele proveniente de H_{AIE}^D , porém tanto suas energias ($j = 3/2$ em 30 meV e $j = 1/2$ levemente abaixo) como o campo ($B_0 \gtrsim 0.1 T$) em que o ordenamento normal dos estados é restabelecido são provenientes de H_R . Além disso, a largura da região de campos críticos é maior (entre 2.2 e 3.6 T no Painel *C*), assim como se verifica no Painel *D* que AC's envolvendo orbitais com $l < 0$ ($l > 0$) ocorrem em campos críticos um pouco menores (maiores) do que o campo $B_C \simeq 2.55 T$ do primeiro AC (*insets* nos Painéis *C* e *D*). Para uma futura comparação, observe no Painel *B* que o primeiro AC envolvendo estados com $n = 1$ ($\simeq 50 meV$), relativo aos níveis $\{0, 1, -1\}$ e $\{1, 0, +1\}$, ocorre no mesmo campo crítico $B_C \simeq 2.55 T$; de forma geral, AC's entre estados com qualquer n

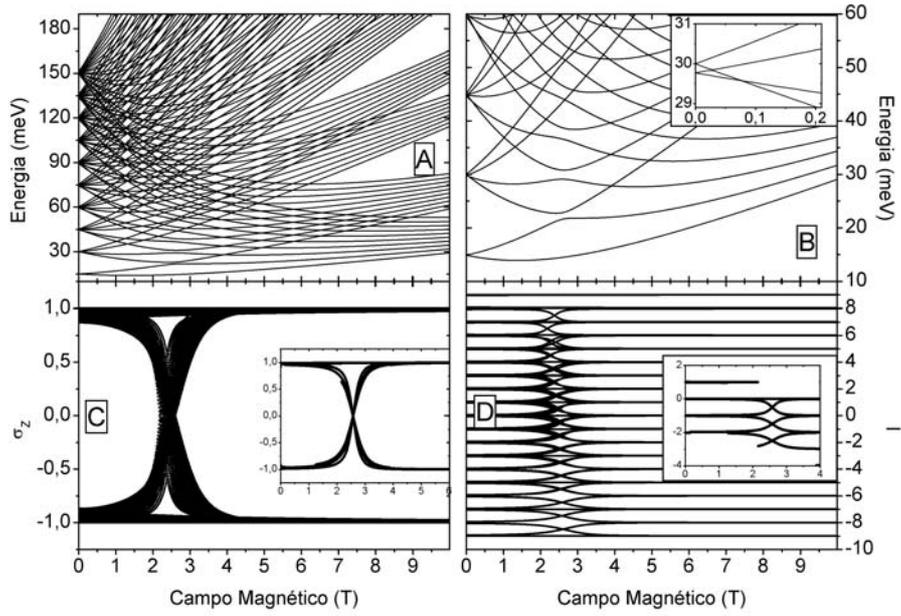


Figura 4.3: Espectro de energia do PQ quando apenas o termo H_R é adicionado a H_0 . Uma forte mistura de níveis ocorre em $B_C \simeq B_C^0 \simeq 2.5 T$, onde quase todos os estados anticruzam.

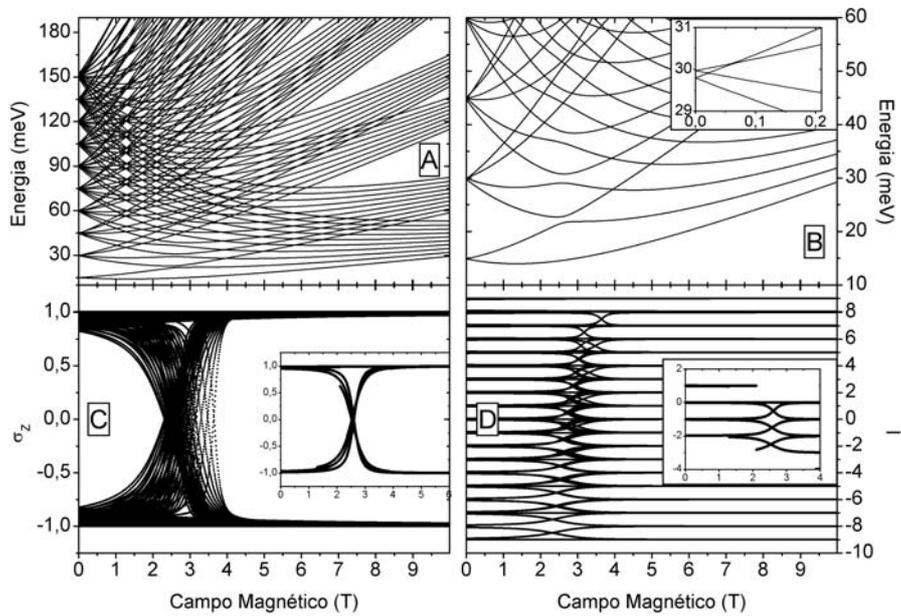


Figura 4.4: Espectro de energia do PQ quando ambos os termos AIE são adicionados a H_0 . A região de anticruzamentos é alargada, embora o primeiro AC ocorra praticamente no mesmo campo magnético de cerca de $2.55 T$. AC's envolvendo orbitais com $l < 0$ ($l > 0$) são deslocados para menores (maiores) campos.

ocorrem aqui basicamente na mesma região de campos críticos, o que fica claro nos Painéis *C* e *D*. Vale lembrar que os efeitos de ambos os termos AIE no sistema podem ser reduzidos ao diminuirmos ω_0 (H_{AIE}^D) ou dV/dz (H_R).

4.6.5 Efeitos do termo Dresselhaus cúbico

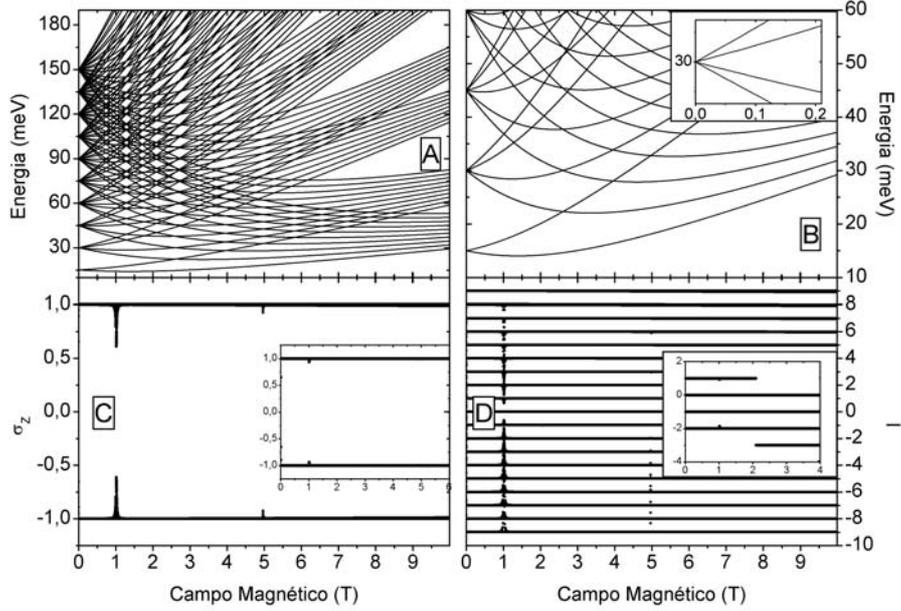


Figura 4.5: Espectro de energia do PQ quando apenas o termo H_D^C é adicionado a H_0 . A influência desse termo é praticamente desprezível sob os parâmetros considerados nessa figura. Porém, veremos adiante que os AC's relativos a esse termo se tornam visíveis quando o campo Rashba é aumentado.

A adição do termo Dresselhaus cúbico H_D^C a H_0 (Fig. 4.5) praticamente em nada muda o espectro FD original, como se verifica nos Painéis *A* e *B* e seu *inset*. Uma pequena mistura de estados, tanto em $B_0 \simeq 1 T$ como em $B_0 \simeq 5 T$, é visível nos Painéis *C* e *D* e seus *insets*. O primeiro AC satisfazendo $\Delta l = \mp 3$ e $\Delta \sigma_z / 2 = \pm 1$, em $1 T$, envolve os estados $\{0, 1, -1\}$ e $\{0, -2, +1\}$, enquanto em $5 T$ ele envolve os estados $\{0, 0, -1\}$ e $\{0, -3, +1\}$, ambos ocorrendo em cerca de $35 meV$; AC's envolvendo níveis mais altos ocorrem sempre ao redor desses dois campos críticos. O operador H_D^C também é, em princípio, capaz de induzir *splittings* a campo nulo no espectro, porém tais *splittings*, assim como os *mini-gaps* abertos nos AC's, são praticamente desprezíveis dada sua pequena influência no sistema quando ele é

considerado em separado dos demais termos SO. A situação será um tanto diferente quando considerarmos o operador H total para um PQ com diferentes parâmetros daqueles presentes na Tab. IV.2.

4.6.6 Efeitos do termo Dresselhaus linear

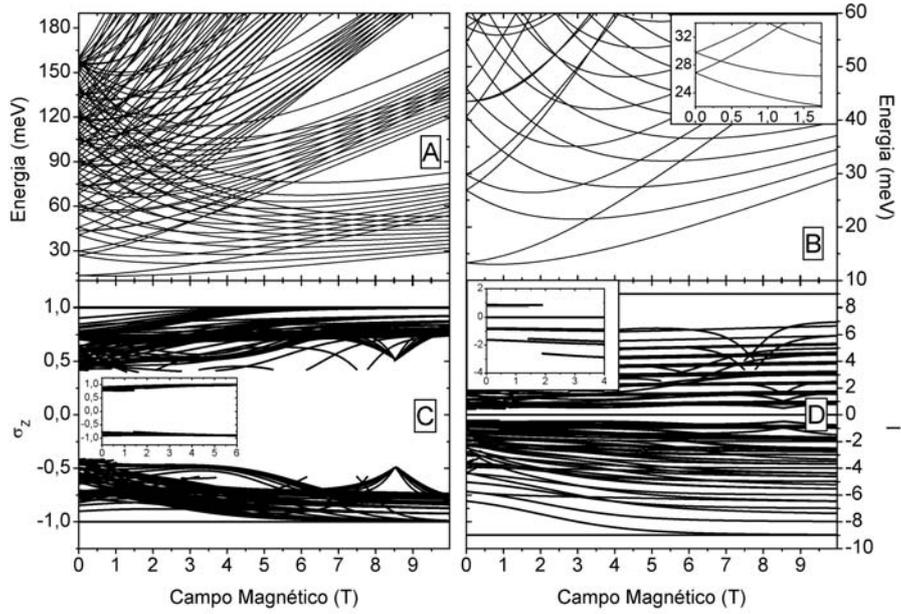


Figura 4.6: Espectro de energia do PQ quando apenas o termo H_D^L é adicionado a H_0 . Embora AC's não sejam induzidos por esse termo, ele altera de forma drástica o espectro ao provocar grandes *splittings* de energia a campo nulo, além de deslocar diversos cruzamentos de níveis a campo finito; o primeiro deles agora ocorre em cerca de 3.3 T. Mesmo os estados de menor energia deixam de ser puros ainda a campo zero.

A adição do termo Dresselhaus linear H_D^L a H_0 (Fig. 4.6) muda de forma drástica as características gerais do espectro FD, deslocando sobremaneira as degenerescências acidentais do PQ em um campo finito; esse operador, porém, não é capaz de induzir AC's em um PQ com $g < 0$. Os *splittings* de energia a campo nulo são tão marcantes (veja Painéis A e B) que os estados do PQ deixam de ser estados puros mesmo a campos muito baixos ou ainda em campo nulo, como mostram os Painéis C e D e seus *insets*. No Painel C, por exemplo, em $B_0 = 0$, valores de $|\sigma_z| < 0.5$ são encontrados para estados de maior energia, enquanto em seu *inset*, relacionado aos 7 estados de menor energia, temos valores de $|\sigma_z| \simeq 0.8$. Os

cruzamentos de níveis também são bem deslocados para campos maiores; como exemplo, note que agora o primeiro desses cruzamentos se dá em $B_C \simeq 3.3 T$. Outro efeito essencial desse termo é exemplificado no *inset* do Painel B, onde apenas um cruzamento é visível na segunda camada (o segundo agora ocorre apenas em um campo bem mais alto, por volta de $3.5 T$, visível nesse mesmo painel), e assim o ordenamento normal dos estados não é mais refeito como nos casos anteriores. Esse fato torna impossível a identificação distinta dos regimes Zeeman e Paschen-Back no espectro do PQ como vinha ocorrendo com todos os outros termos SO, e será essencial na discussão do Hamiltoniano total a seguir. Note ainda nesse *inset* que o estado de maior energia ($j = 3/2$) tem o mesmo valor de H_0 ($30 meV$), e o de menor energia ($j = 1/2$) é bem mais deslocado para baixo. Vale também lembrar que o efeito desse termo no espectro pode ser reduzido ao aumentarmos o valor de z_0 .

4.6.7 Inclusão simultânea de ambos os termos Dresselhaus

A Fig. 4.7 mostra a adição simultânea de ambos os termos AIB , H_D^C e H_D^L , a H_0 . É visível que ao considerarmos apenas as contribuições AIB ao espectro FD, o termo linear domina totalmente o termo cúbico, quando os parâmetros da Tab. IV.2 são usados.

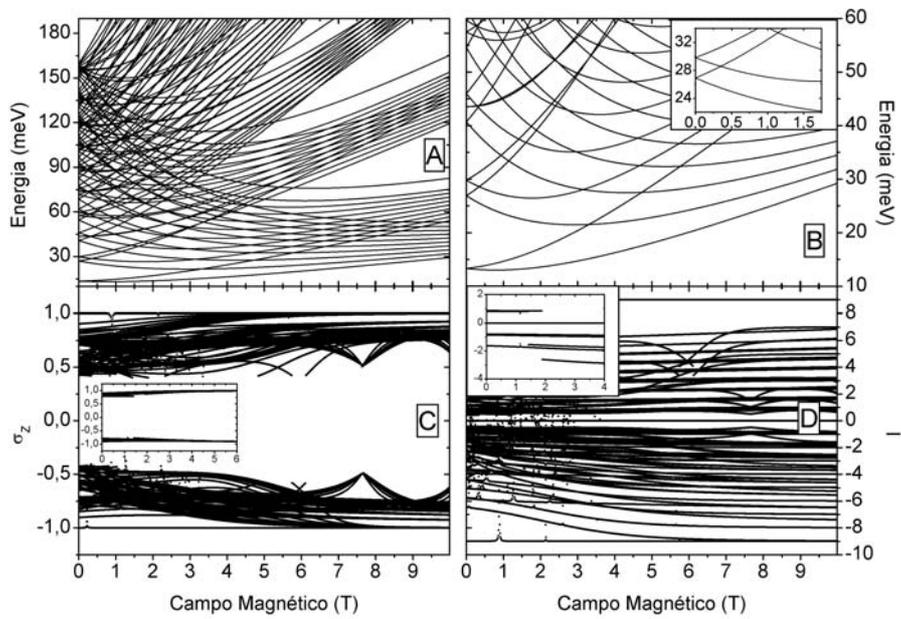


Figura 4.7: Espectro de energia do PQ quando ambos os termos AIB são adicionados a H_0 . Com os parâmetros considerados, o termo Dresselhaus linear domina totalmente o termo cúbico.

4.6.8 Inclusão simultânea de todas as interações *spin-órbita*

Finalmente, a Fig. 4.8 mostra a adição simultânea de todos os termos SO a H_0 . Pela discussão anterior, podemos identificar quais mecanismos SO são dominantes em cada uma das principais assinaturas do espectro. A enorme mistura de estados mesmo a campos próximos de zero (Painéis *A*, *C* e *D*), assim como *splittings*, posição e ordenamento de estados são dominados por H_D^L (Painel *B* e *inset*), embora com contribuições dos termos AIE. A influência do termo H_D^C ainda parece indistinguível. Todos os AC's são determinados pelo termo Rashba H_R , embora sejam deslocados para campos críticos maiores por causa do termo Dresselhaus linear. Observe que o primeiro AC foi deslocado de $B_C \simeq 2.55 T$ (Fig. 4.4) para $B_C \simeq 3.3 T$ (Painel *B* e *insets* nos Painéis *C* e *D*), e que as regiões de campos críticos são mais alargadas.

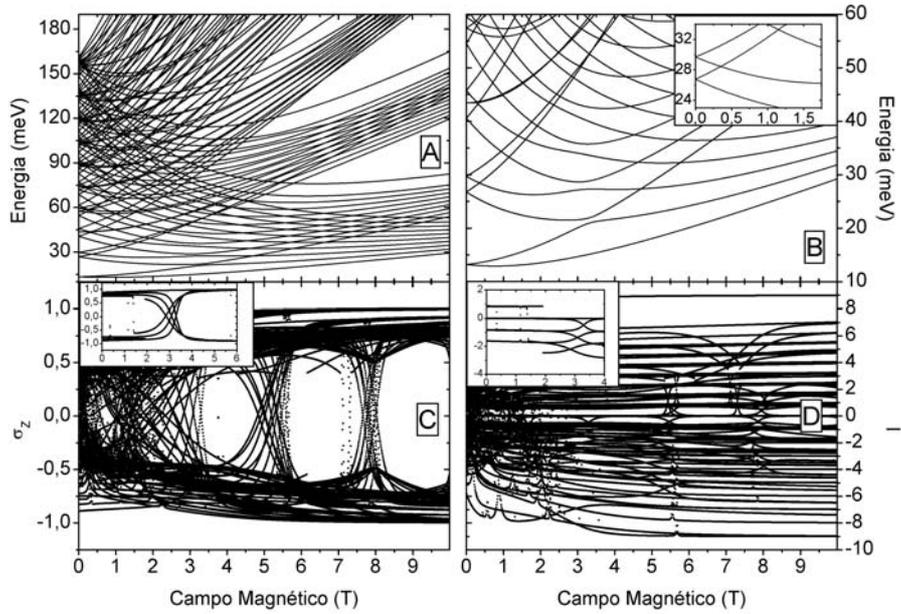


Figura 4.8: Espectro de energia do PQ quando todos os termos SO possíveis são simultaneamente adicionados a H_0 . Basicamente, o termo H_R induz AC's no espectro, que são deslocados por H_D^L para campos maiores. A característica mais marcante da presença simultânea de todos os termos é que AC's relativos a estados com distintos n agora se agrupam em diferentes campos magnéticos críticos.

No entanto, a nova e marcante característica de H total é a clara presença de mais do que uma única região de AC's. Ao compararmos os Painéis *A* e *C*, nota-se que a primeira família de AC's (ao redor de $B_C \simeq 3.3 T$ e relativa aos estados com energias entre 20 e 60 meV) envolve

apenas níveis com $n = 0$, os primeiros AC's sendo entre $\{0, 0, -1\}$ e $\{0, -1, +1\}$, $\{0, -1, -1\}$ e $\{0, -2, +1\}$, $\{0, -2, -1\}$ e $\{0, -3, +1\}$, ... ; a segunda família de AC's (ao redor de $5 T$ e relativa aos estados com energias entre 70 e $110 meV$) envolve apenas níveis com $n = 1$ (exceto o inicial), os primeiros AC's sendo entre $\{0, 1, -1\}$ e $\{1, 0, +1\}$, $\{1, 0, -1\}$ e $\{1, -1, +1\}$, $\{1, -1, -1\}$ e $\{1, -2, +1\}$, ... ; a terceira família de AC's (ao redor de $8 T$ e relativa aos estados com energias entre 150 e $190 meV$) envolve apenas níveis com $n = 2$ (exceto os iniciais), os primeiros AC's sendo entre $\{0, 2, -1\}$ e $\{1, 1, +1\}$, $\{1, 1, -1\}$ e $\{2, 0, +1\}$, $\{2, 0, -1\}$ e $\{2, -1, +1\}$, Embora AC's no espectro sejam causados pelas regras de seleção de H_R , a presença de H_D^L no Hamiltoniano total desloca-os de tal maneira a agrupar, ao redor de um mesmo campo crítico, AC's relativos a um mesmo n . A causa disso pode ser entendida ao compararmos, por exemplo, os Painéis B e seus *insets* nas Figs. 4.4 e 4.6; note na Fig. 4.4 a presença de 2 cruzamentos na segunda camada, ainda em baixos campos, e daí o primeiro AC envolvendo um nível com $n = 1$ (entre $\{0, 1, -1\}$ e $\{1, 0, +1\}$) ocorre no mesmo campo crítico que os AC's entre estados com $n = 0$; já na Fig. 4.6 a presença de apenas um cruzamento na segunda camada, a baixos campos, desloca esse AC entre $\{0, 1, -1\}$ e $\{1, 0, +1\}$ para um campo crítico mais alto.

4.6.9 Cancelamento dos acoplamentos *spin-órbita*

Todas as figuras anteriores são relacionadas a um PQ definido pelos parâmetros da Tab. IV.2. Exemplificamos nas duas próximas figuras como diferentes magnitudes da interação SO afetam o espectro do PQ.

Na Fig. 4.9 consideramos um sistema mais largo, com um valor de z_0 que é o dobro do considerado na Tab. IV.2 (demais parâmetros são iguais); isso equivale a diminuir a influência do termo Dresselhaus (apenas o linear) no sistema. Como esperado, o espectro se torna bem similar ao da Fig. 4.4, onde apenas termos AIE estão incluídos. Note que o primeiro AC foi movido de volta a $B_C \simeq 2.55 T$, e que todos os AC's ocorrem novamente ao redor desse mesmo campo crítico, já que o termo H_D^L não é mais forte o suficiente para deslocar AC's envolvendo estados com n diferentes; porém, como ele não é nulo, a região de campos críticos em torno de B_C é um pouco mais larga aqui. As pequenas misturas ao redor de 1 e $5 T$ se relacionam, como antes, ao termo Dresselhaus cúbico.

Na Fig. 4.10 tentamos simular o caso em que os *splittings* de energia a campo nulo são cancelados mesmo na presença de todos os termos SO, o que é razoavelmente obtido ao tomarmos

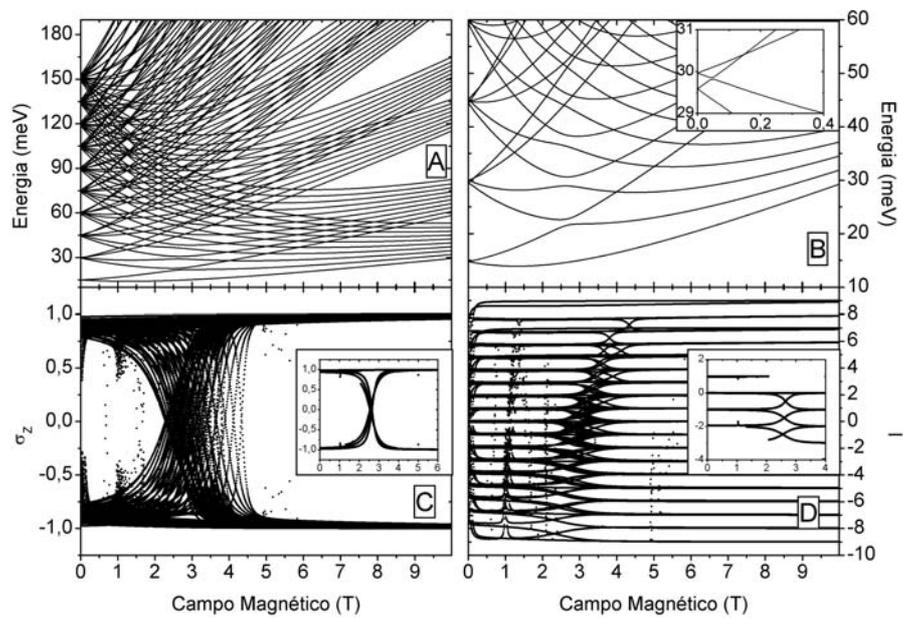


Figura 4.9: Espectro de energia do PQ quando todos os termos SO possíveis são simultaneamente adicionados a H_0 e a largura z_0 é dobrada. Como esperado por causa da diminuição da influência do termo H_D^L , o espectro apresenta características similares às da Fig. 4.4, embora com a largura da região de campos críticos sendo um pouco maior aqui.

um campo interfacial dV/dz quatro vezes maior do que o considerado na Tab. IV.2 (demais parâmetros iguais); isso equivale a aumentar a influência do termo Rashba (apenas o não-diagonal) no espectro do PQ. Note nos Painéis *A* e *B* que tais *splittings* razoavelmente se anulam, e que uma estrutura de camadas de energia a campo nulo semelhante ao espectro de H_0 puro da Fig. 4.1 é formada, embora em energias menores, mas com a mesma separação de 15 meV ; no *inset* do Painel *B* notamos que a energia do nível $j = 3/2$ foi reduzida à do nível $j = 1/2$, passando de 30 para 26.5 meV (compare com o mesmo *inset* da Fig. 4.8). Se por um lado os *splittings* a campo nulo se anulam, os mini-*gaps* de energia abertos nos AC's são ainda maiores (Painel *B*). O rearranjo dos níveis eletrônicos é tão marcante que os AC's relativos ao termo Dresselhaus cúbico se tornam pela primeira vez visíveis; como exemplo, note no Painel *B* em um campo de 1.2 T e em energias de 33 e 44 meV , respectivamente, os AC's entre os estados $\{0, 1, -1\}$ e $\{0, -2, +1\}$, e entre $\{1, 0, -1\}$ e $\{0, -3, +1\}$. Vale ressaltar que, embora os níveis eletrônicos sejam aqui menos dispersos do que na Fig. 4.8, a mistura de estados é muito mais intensa, como se verifica nos Painéis *C* e *D*; veja que mesmo a campo nulo, todos os estados têm $|\sigma_z| < 0.5$, exceto o estado fundamental que possui $|\sigma_z| \simeq 0.7$. Repare nos *insets* dos Painéis *C* e *D* que, como já mencionado, esse maior acoplamento Rashba alarga a região ao redor do campo crítico, mas tem pouco efeito em próprio seu valor; note que $B_C \simeq 2.7 \text{ T}$ para o primeiro AC, e perceba a estrutura ao redor de 1.2 T , que como vimos, está ligada ao primeiro AC relativo ao termo H_D^C .

4.7 Influência de diferentes raios e larguras do ponto quântico

Embora diminuir a influência de H_D^L pareça, em princípio, ser similar a aumentar a influência de H_R no espectro, note que as Figs. 4.9 e 4.10 são totalmente diferentes, o que mostra a intrincada competição entre os 4 termos SO na definição das propriedades eletrônicas do PQ. Uma outra comparação de três dessas propriedades - *splittings* de energia a campo nulo, campos críticos e mini-*gaps* abertos nos AC's - é feita nas duas figuras a seguir, a primeira como função do raio lateral l_0 do PQ, e a segunda como função da altura vertical z_0 do sistema; em ambas, o Painel esquerdo mostra o *splitting* de energia a campo nulo entre os dois estados, $j = 3/2$ e $j = 1/2$, da segunda camada, o Painel intermediário mostra o valor do campo magnético crítico

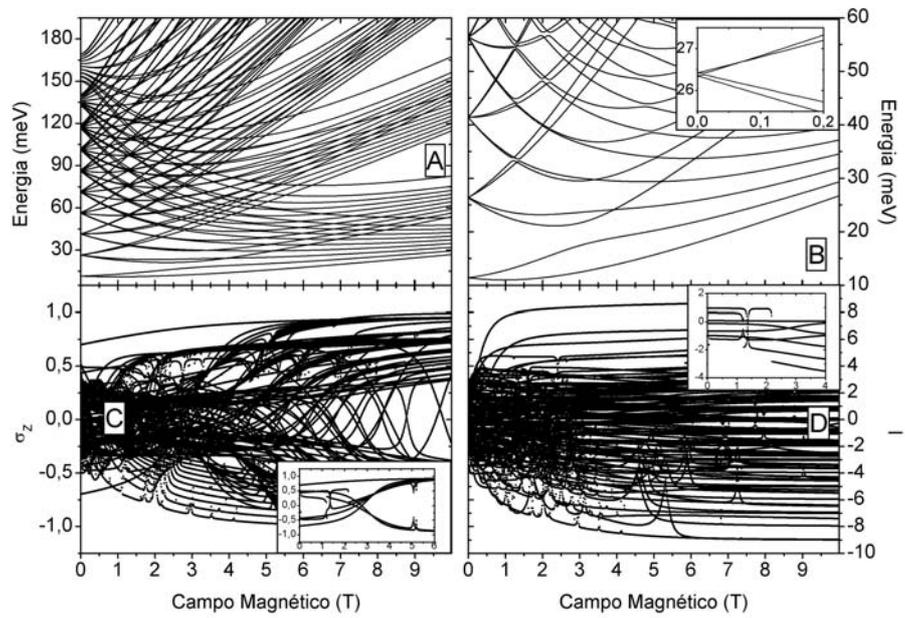


Figura 4.10: Cancelamento dos *splittings* de energia a campo nulo no espectro de energia do PQ quando todos os termos SO possíveis são simultaneamente adicionados a H_0 e a intensidade do campo interfacial dV/dz é quadruplicada. AC's relativos às regras de seleção de H_D^C se tornam visíveis em $B_0 \simeq 1.2 T$. Uma enorme mistura de estados ocorre a qualquer campo; a campo nulo, praticamente todos os estados possuem $|\sigma_z| < 0.5$.

B_C em que os dois estados de menor energia do PQ, $\{0, 0, -1\}$ e $\{0, -1, +1\}$, apresentam AC, e o Painel direito mostra o valor do mini-gap de energia aberto nesse AC. Nessas duas figuras, curvas que têm quadrado, círculo, e triângulo como símbolos referem-se, respectivamente, a um PQ definido pelos parâmetros da Tab. IV.2, a uma largura z_0 dobrada, e a um campo interfacial dV/dz quadruplicado; as setas em $l_0 = 190 \text{ \AA}$ e em $z_0 = 40 \text{ \AA}$ indicam as dimensões em que os espectros das Figs. 4.1 a 4.8 foram calculados, e a linha pontilhada indica o campo B_C^0 dado pela Eq. 4.20 em que ocorre o cruzamento dos níveis FD $\{0, 0, -1\}$ e $\{0, -1, +1\}$ quando nenhum termo SO é levado em conta.

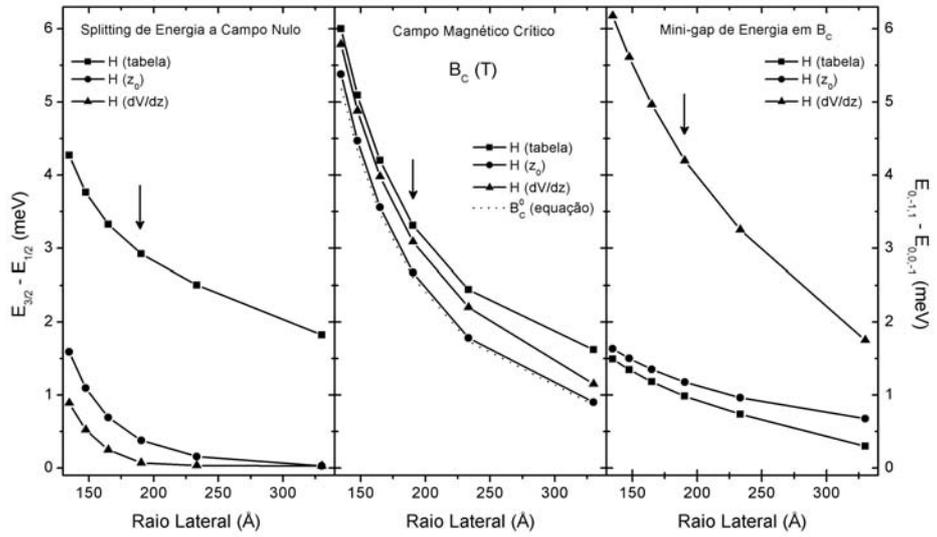


Figura 4.11: *Splittings* de energia a campo nulo (Painel esquerdo), campo magnético crítico (Painel intermediário), e mini-gaps de energia abertos nos AC's (Painel direito) como função do raio do PQ. Quadrados, círculos e triângulos indicam, respectivamente, que a ilha é definida pelos parâmetros da Tab. IV.2, que sua altura é dobrada, e que seu campo interfacial é quadruplicado. A linha pontilhada indica B_C^0 dado pela Eq. 4.20.

Com relação aos *splittings* de energia a campo nulo, lembramos que os mesmos são dominados pelo termo Dresselhaus linear. Note na Fig. 4.11 que eles diminuem ao aumentarmos l_0 , chegando a 1.8 meV quando o raio lateral é de 330 \AA ($\hbar\omega_0 = 5 \text{ meV}$) para os parâmetros da Tab. IV.2. Note que essa diminuição é bem mais drástica se aumentarmos z_0 ou dV/dz , quase anulando o *splitting* quando $l_0 > 300 \text{ \AA}$; no primeiro caso, a influência de H_D^L é diminuída, enquanto no segundo a influência de H_R é aumentada. O mesmo comportamento, e pelo mesmo

motivo, é observado com relação a z_0 na Fig. 4.12 para os parâmetros da Tab. IV.2, onde o *splitting* quase se anula para $z_0 > 100 \text{ \AA}$. Nessa mesma figura, comprovamos que se o campo interfacial é quadruplicado para uma altura ainda de 40 \AA , o *splitting* é praticamente cancelado, como abordado na Fig. 4.10, aumentando com z_0 até saturar em cerca de 2.6 meV para $z_0 > 100 \text{ \AA}$. Com relação ao efeito de se ajustar os termos SO para produzir um cancelamento dos *splittings*, a Ref. [84] cita tal possibilidade, em um GE2D, incluindo-se apenas os termos H_D^L e H_R ; entretanto, a inclusão dos demais termos H_D^C e H_{AIE}^D é necessária para a obtenção de valores mais apurados em PQ's. Tomando como exemplo os PQ's de InSb aqui abordados, os valores de z_0 ou dV/dz necessários para tal cancelamento são cerca de 10% menores do que seriam se considerássemos apenas os termos H_D^L e H_R . Vale relembrar, todavia, que tal sintonia de parâmetros é capaz de cancelar os *splittings* a campo nulo, mas não tem o mesmo efeito nos mini-gaps de energia, nem tampouco é capaz de alterar o valor dos campos críticos. Uma medida dessas quantidades na mesma amostra seria capaz, em princípio, de fornecer melhores estimativas para os parâmetros de acoplamento SO α e γ , uma vez que há uma região razoavelmente larga de valores na literatura para o mesmo material.

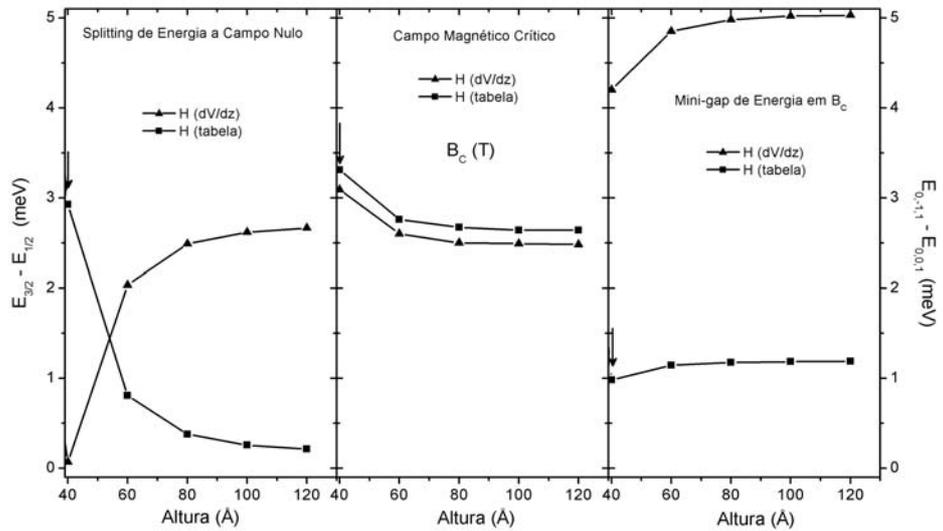


Figura 4.12: *Splittings* de energia a campo nulo (Painel esquerdo), campo magnético crítico (Painel intermediário), e mini-gaps de energia (Painel direito) como função da altura do PQ. Quadrados e triângulos indicam, respectivamente, que a ilha é definida pelos parâmetros da Tab. IV.2 e que seu campo interfacial é quadruplicado.

No que se refere aos valores dos campos críticos onde os mini-*gaps* são abertos, já vimos que os mesmos são determinados por H_R (para o par de níveis em questão), e têm valores próximos de B_C^0 quando termos AIB não estão presentes; a inclusão de H_D^L é capaz de deslocar B_C para campos maiores. Veja na Fig. 4.11, para os parâmetros da Tab. IV.2, que B_C diminui com l_0 similarmente a B_C^0 dado na Eq. 4.20 (linha pontilhada). Aumentar o campo dV/dz só produz razoáveis mudanças em raios maiores; em 330 \AA , por exemplo, B_C diminui de 1.6 para $1.1 T$. Como esperado, ao aumentar a largura z_0 , B_C se torna praticamente idêntico a B_C^0 . Perceba na figura que campos críticos menores que $1 T$ são realizáveis; efeitos em campos mais baixos são mais fáceis de se observar experimentalmente. Na Fig. 4.12 fica claro que B_C satura em cerca de 2.5 ou $2.6 T$, dependendo do campo dV/dz , para $z_0 > 100 \text{ \AA}$. É interessante fazermos uma comparação de nossos resultados com aqueles da Ref. [100], em que considera-se um PQ de InSb com $\hbar\omega_0 = 7.5 \text{ meV}$ ($l_0 = 270 \text{ \AA}$), sem que termos AIB sejam levados em conta, e onde $B_C = 1.7 T$ é encontrado. Na Fig. 4.11, quando $l_0 = 270 \text{ \AA}$, vemos que o campo crítico diminui de 2.1 para 1.8 e finalmente para $1.5 T$ ao aumentarmos dV/dz e z_0 , respectivamente; esse último valor é aquele que em nossos cálculos melhor simula a Ref. [100], já que a influência de H_D^L é nele desprezível. A diferença de cerca de $0.2 T$ deve-se, provavelmente, ao fato de aquela referência levar em conta efeitos de não-parabolicidade da banda de condução, que podem deslocar B_C para um campo levemente maior.

Já com relação aos mini-*gaps* de energia abertos nos AC's, a principal contribuição também vem do termo Rashba H_R (para o par de níveis em questão). Note na Fig. 4.11 que eles diminuem com o raio lateral, e que o aumento de z_0 provoca um pequeno aumento em seus valores; já um aumento em dV/dz alarga os mini-*gaps* drasticamente, passando, por exemplo em 190 \AA , de 1 para 4.2 meV . Observe na Fig. 4.12 o aumento dos mini-*gaps* com z_0 , até uma saturação em cerca de 100 \AA , e note novamente o enorme aumento causado pelo campo Rashba dV/dz do mini-*gap* de energia aberto nesse AC.

4.8 Ponto quântico com 2 elétrons interagentes

Após termos detalhado o problema de um PQ de partícula única, tratamos nessa seção do problema de um PQ com 2 partículas interagentes na presença de um campo magnético e das 4 formas não nulas de interação SO embutidas no modelo. Optamos, no entanto, em não

detalhar a influência separada de cada um dos termos SO como fizemos no caso de partícula única. Os parâmetros definindo o PQ estão, novamente, dados na Tab. IV.2. Na construção dos estados anti-simetrizados de 2-partículas, incluímos os 20 orbitais de 1-partícula com $|l| \leq 3$ e $n \leq 1$ os quais constituem, a campo nulo, as 4 primeiras camadas de energia de H_0 (veja Fig. 4.1), perfazendo assim um total de 190 estados possíveis de 2-partículas; na ausência de efeitos SO esses estados podem ser rotulados, como já mencionamos, de acordo com as projeções dos momentos angulares totais orbital (M_L) e de *spin* (M_S).

A Fig. 4.13 mostra o espectro magnético de 2 partículas interagentes na ausência de interação SO, ou seja, na Eq. 4.19 tomamos $H = H_0$. Se os 2 elétrons no PQ fossem não-interagentes, teríamos a campo nulo camadas de energia entre 30 e 120 meV , espaçadas novamente em 15 meV ; sob um campo magnético, os estados tendo M_L negativo e M_S positivo adquiririam menor energia. A presença da interação Coulombiana, no entanto, é capaz de deslocar essas camadas para energias maiores, além de também provocar *splittings* de energia a campo nulo. Embora seja o Painel esquerdo que mostre todos os estados obtidos da diagonalização numérica, é o Painel direito que possibilita um melhor estudo do sistema interagente. Se apenas a interação Coulombiana direta estivesse presente, ou seja, se não levássemos em conta a natureza anti-simétrica das funções de onda do PQ, os estados a campo nulo seriam deslocados em cerca de 5 meV para maiores energias; daí, o estado fundamental (2 elétrons na primeira camada de H_0) estaria em 35 meV , a primeira camada excitada (1 elétron na primeira e outro na segunda camada de H_0) em 50 meV , e a segunda camada excitada (1 elétron na primeira e outro na terceira, ou 2 elétrons na segunda camada de H_0) em 65 meV . Entretanto, a presença da interação Coulombiana de troca é capaz de, mesmo a campo nulo, quebrar parte da degenerescência dos estados (exceto o singlete do estado fundamental) e induzir *splittings* no espectro, mesmo na ausência de interação SO. Note como exemplo a primeira camada excitada, em que enquanto um singlete de energia permanece em 50 meV , um tripleto é deslocado e reduzido pela interação de troca para cerca de 47.5 meV . Na presença de um campo magnético pequeno ($\simeq 0.1 T$), a sequência dos 9 primeiros estados do PQ, em ordem crescente de energia e com a notação $\{M_L, M_S\}$, é $\{0, 0\}$ para o singlete fundamental, $\{-1, 1\}$, $\{-1, 0\}^T$, $\{-1, -1\}$, $\{1, 1\}$, $\{1, 0\}^T$, e $\{1, -1\}$ para o primeiro tripleto excitado, e $\{-1, 0\}^S$ e $\{1, 0\}^S$ para o primeiro singlete excitado, com os índices T e S tendo significados óbvios. Para a discussão a seguir, é interessante ressaltar três pontos: primeiro, o cruzamento de níveis de mais baixa

energia ocorre em $B_C^{0(2e)} = 2.1 T$ envolvendo os estados $\{0, 0\}$ e $\{-1, 1\}$ (no caso de 1 partícula tínhamos $B_C^0 = 2.6 T$); segundo, em $0.75 T$ o estado $\{-1, 0\}^S$ deixa de ser o oitavo e se torna o quarto estado menos energético do sistema, com energia relativamente próxima à do terceiro estado, $\{-1, 0\}^T$; terceiro, esses dois estados $\{-1, 0\}^{S/T}$ cruzam com o estado de menor energia oriundo da segunda camada excitada, $\{-2, 1\}$, respectivamente, em 2.1 e $2.6 T$. Optamos em não mostrar nessa figura a evolução de M_L e M_S com B_0 para todos os estados, conforme feito na Fig. 4.1 para l e σ_z , pois obviamente estes são estados puros, assumindo apenas valores inteiros com $|M_L| \leq 6$ e $|M_S| \leq 1$.

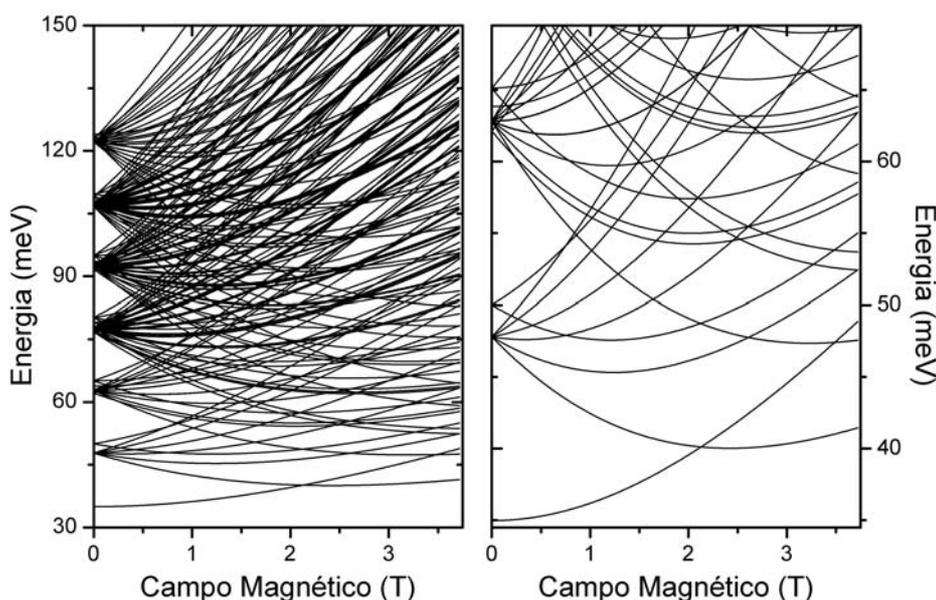


Figura 4.13: Espectro de um PQ com 2 partículas interagentes na ausência de efeitos *spin*-órbita. Enquanto o Painel esquerdo mostra todos os estados considerados, o Painel direito mostra, principalmente, o estado fundamental singlete, e a separação, a campo nulo, dos primeiros singlete e tripleto excitados provocada pela energia Coulombiana de troca.

A Fig. 4.14 mostra o espectro obtido ao considerarmos o Hamiltoniano total da Eq. 4.19, com todas as 4 possíveis contribuições SO incluídas em H . Podemos identificar no espectro total do Painel A características similares ao caso de partícula única: o termo Dresselhaus linear praticamente desfaz as camadas de energia a campo nulo, ao provocar deslocamentos de cruzamentos e AC's de níveis, o termo Rashba não-diagonal abre *mini-gaps* no espectro, e ambos causam novos *splittings* de energia a campo nulo. No painel B podemos entender

com mais detalhes a competição entre as interações Coulombiana e SO no espectro de PQ's. Note primeiramente, a campo nulo, que a interação SO age contra a Coulombiana direta e, em certo sentido, favorece a interação de troca. O estado fundamental, por exemplo, retorna de 35 para 31 meV , perto do valor não-interagente de 30 meV , enquanto as duas primeiras camadas excitadas passam a ter inclusive estados com energia menor do que o caso não-interagente: os estados da primeira estão na região de 43 a 47 meV , enquanto os da segunda estão entre 57 e 63 meV . Outro ponto importante verifica-se, por exemplo, na primeira camada excitada, onde o tripleto original é quebrado em suas três possíveis componentes de acordo com a projeção do momento angular total, $M_J = M_L + M_S$; estas são compostas, em campos próximos de zero, pelos estados $\{-1, 1\}$ e $\{1, -1\}$ ($M_J = 0$), $\{-1, 0\}$ e $\{1, 0\}$ ($|M_J| = 1$), e $\{-1, -1\}$ e $\{1, 1\}$ ($|M_J| = 2$), em ordem crescente de energia; os singletos fundamental ($M_J = 0$) e primeiro excitado ($|M_J| = 1$) continuam como antes. A campo finito, percebe-se que as regiões de campos críticos em que AC's ocorrem são mais alargadas, embora campos ao redor de 3.2, 5.6 e 8.1 T sejam predominantes, conforme mostram os Painéis C e D . O primeiro AC, abrindo um mini-gap entre os estados $\{0, 0\}$ e $\{-1, 1\}$, ocorre em $B_C^{(2e)} = 2.7 T$; vale lembrar que no caso de partícula isolada tínhamos $B_C = 3.3 T$. Já o cruzamento em 0.75 T mencionado no parágrafo anterior agora ocorre em cerca de 1 T , e os dois estados $\{-1, 0\}^{S/T}$ agora apresentam AC's com o estado $\{-2, 1\}$ em campos de 2.6 e 3.2 T , respectivamente.

Para melhor compreender esses AC's de menor energia, mostramos na Fig. 4.15 a evolução com o campo magnético apenas dos estados indicados pelo retângulo no Painel B da figura anterior. Enquanto os painéis maiores, à esquerda, incluem os 9 estados de menor energia do PQ, nos painéis menores, à direita (superiores para M_S e inferiores para M_L), mostramos separadamente os 2 (3) estados que participam do primeiro (segundo) AC em cerca de 39 (46) meV ; os rótulos de 1 a 5 indicam a sequência de estados em ordem crescente de energia. O AC entre os estados 1 e 2 ($\{0, 0\}$ e $\{-1, 1\}$) é evidente em $B_C^{(2e)} = 2.7 T$. Já o AC entre os estados 3, 4 e 5 ($\{-1, 0\}^T$, $\{-1, 0\}^S$ e $\{-2, 1\}$) tem uma característica própria; note que primeiro há uma mistura entre os estados 4 e 5 (em 2.6 T), e logo em seguida uma mistura entre os estados 4 e 3 (em 3.2 T), de forma que o estado 4 acaba agindo como um intermediário dos dois AC's, e os valores M_L e M_S desse estado, antes e depois da região de campos críticos, são conservados. É como se houvesse apenas um AC efetivo entre os estados 3 e 5. Todos esses AC's obedecem a uma regra de seleção similar à do termo Rashba H_R de 1-partícula,

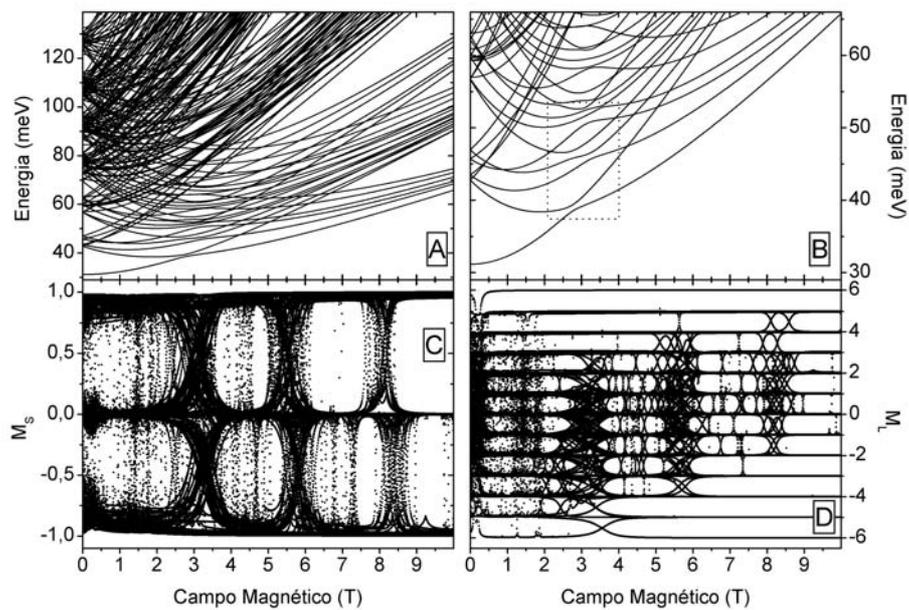


Figura 4.14: Espectro de um PQ com 2 partículas interagentes na presença de todos os termos *spin*-órbita (Painel A). A energia SO age contra a Coulombiana direta e a favor da energia de troca. Os estados do primeiro tripleto excitado, a campo nulo, são separados de acordo com os valores de M_J possíveis (Painel B). Campos magnéticos onde ocorrem a maioria dos AC's são visíveis. O retângulo no Painel B indica os AC's de menor energia, detalhados na próxima figura. Os Painéis C e D mostram, respectivamente, a evolução com o campo magnético das projeções dos momentos angulares totais de *spin* e orbital do PQ.

dada por $\Delta M_L = \pm 1 = -\Delta M_S$. Assim como discutido na Fig. 4.8, quando os parâmetros da Tab. IV.2 são também usados para o PQ de 2 partículas, a influência do termo Dresselhaus cúbico se mostra mínima na abertura de *mini-gaps* no espectro; suas regras de seleção se tornam $\Delta M_L = \mp 3$ e $\Delta M_S = \pm 1$, e os primeiros AC's possíveis são entre os estados $\{-2, 1\}$ e $\{1, 0\}^{S/T}$. Provavelmente, conforme ocorrido no caso de partícula isolada mostrado na Fig. 4.10, AC's relativos ao termo H_D^C devem se tornar visíveis no espectro de 2 partículas ao aumentarmos o campo interfacial dV/dz .

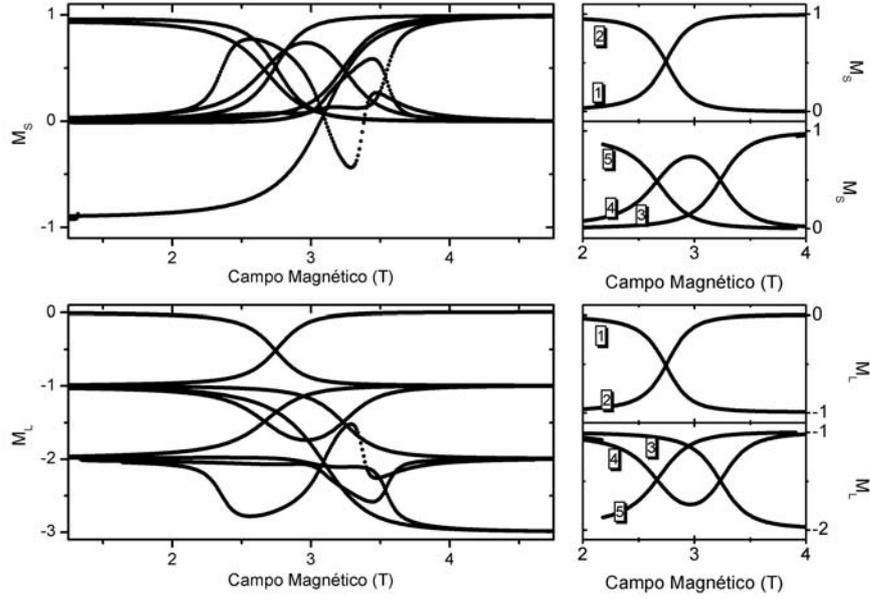


Figura 4.15: Anticruzamentos de menor energia no espectro do PQ interagente sob ambos os efeitos *spin*-órbita AIE e AIB. Nos Painéis esquerdos mostramos a evolução com o campo magnético (das projeções M_S e M_L) dos 9 primeiros estados indicados pelo retângulo no Painel B da figura anterior. Nos Painéis direitos, mostramos os AC's existentes entre os 5 primeiros estados do PQ, numerados em ordem crescente de energia; note que o terceiro estado anticruza tanto com o quarto como com o quinto estado, de forma a não alterar sua simetria no processo.

4.9 Considerações

Uma distinção essencial entre os casos de 1 e 2 partículas deve ser explicitada. Enquanto em um PQ de 1 partícula não há qualquer AC envolvendo seu estado fundamental, note que o AC de menor energia em um PQ com 2 partículas envolve, por sua vez, o estado fundamental do

sistema, sendo relacionado a uma mistura singleto-triplete. Vale também notar que o campo crítico em que ocorre esse primeiro AC diminui quando o número de partículas aumenta, passando de $B_C = 3.3 T$ para $B_C^{(2e)} = 2.7 T$; na Ref. [100], em que devemos lembrar que diferentes parâmetros definem o PQ de InSb, o campo crítico passa de $1.7 T$ (1 partícula) para $1 T$ (2 partículas), o que fornece praticamente a mesma variação do campo magnético com N , a pequena diferença podendo ser novamente atribuída aos efeitos de não-parabolicidade da banda de condução levados em conta naquela referência. Vale ainda lembrar que esses campos críticos podem ser feitos menores ao diminuirmos a energia de confinamento do sistema, fato originado da Eq. 4.20. Essa forte mistura intrínseca singleto-triplete, envolvendo o estado fundamental do sistema em baixos campos magnéticos pode, em princípio, ser explorada na implementação de dispositivos de computação quântica (qubits).

Nos campos magnéticos em que ocorre essa mistura intrínseca, a taxa de relaxação de *spin* Γ , induzida pelos termos SO, pode ser estimada de $\Gamma = \hbar/\Delta$, onde Δ é o tamanho em energia do *mini-gap* aberto nesses AC's. Para o AC de menor energia do PQ, os valores de Δ são analisados no Painel direito das Figs. 4.11 e 4.12. Delas, vemos que o valor de Δ é totalmente modificável de acordo com os parâmetros do sistema e, conseqüentemente, a taxa de relaxação de *spin* Γ pode ser feita maior ou menor de acordo com esses mesmos parâmetros.

Capítulo V

Conclusão

Analizamos propriedades eletrônicas e de transporte de pontos quânticos semicondutores de materiais de *gap* largo e estreito. Estudamos os efeitos nessas propriedades de parâmetros como interação Coulombiana, campo magnético, interação *spin*-órbita, e geometria do confinamento.

Em um PQ esférico, vimos como o esquema de acoplamento **LS** foi capaz de fornecer bons resultados para os estados de até 3 partículas na ilha, quando a interação elétron-elétron foi tratada de forma perturbativa. Por causa do alto fator g do InSb comparado ao do GaAs, cruzamentos de níveis foram verificados no PQ de InSb, mesmo com as limitações do campo magnético impostas pelo negligenciamento do termo diamagnético. A simetria em L e S implícita dos estados foi essencial na determinação da corrente de tunelamento, principalmente na origem das regiões de corrente negativa. Mostramos como há, em adição ao mecanismo de bloqueio de *spin*, um outro mecanismo de bloqueio totalmente relacionado à simetria espacial do problema. Enquanto é ela quem determina, a campo nulo, o ordenamento de níveis de partícula isolada, é a interação elétron-elétron quem determina a seqüência de estados dentro de um dado multiplete. Na geometria esférica, estados com L e S máximos são os de menor energia em um multiplete excitado, sendo que mostramos que no caso de uma ilha quasi-unidimensional, os estados polarizados em *spin* são os de maior energia. Esse fato tem efeitos diretos nas propriedades de transporte do sistema, visto que são esses estados que dão origem às regiões de corrente negativa.

Em seguida, pudemos comprovar com os formalismos de Roothan e Pople-Nesbet, também aplicados a um PQ esférico, como uma teoria de campo médio na presença de um campo magnético de qualquer magnitude é capaz de fornecer uma razoável descrição da estrutura de

camadas de energia do PQ, onde consideramos uma ocupação de até 40 elétrons e tivemos que encontrar nossa própria base gaussiana. Vimos como o campo magnético é capaz de influir na energia total de estados fundamentais mesmo que de configurações de camada fechada. Também verificamos como o potencial químico e a energia de carregamento da ilha reproduzem as estruturas de fechamentos e semi-fechamentos de camadas de energia. Com o cálculo do *spin* total para cada ocupação, pudemos comprovar que a Regra de Hund é satisfeita a campo nulo. Porém, a presença de um campo magnético viola sua aplicabilidade e, em específicos campos, transições que mudam a simetria do estado fundamental são observadas.

Por fim, analisamos detalhadamente a influência de cada um dos possíveis mecanismos de interação SO, causados pelas assimetrias de inversão tanto estrutural quanto *bulk*, no espectro FD de PQ's parabólicos litograficamente definidos tendo $g < 0$. Vimos que o termo Rashba se decompõe em duas contribuições lineares no momento k , uma delas diagonal, e o termo Dresselhaus também se separa em duas contribuições, uma linear e outra cúbica em k . Mostramos que o termo H_{AIE}^D induz pequenos *splittings* a campo nulo; que o termo H_R produz um pleno colapso e mistura - anticruzamento - dos estados em um dado campo magnético crítico, o qual depende dos parâmetros do sistema; que o termo H_D^C é desprezível para um certo conjunto de parâmetros definindo o PQ; e que o termo H_D^L produz uma enorme mistura de níveis, principalmente em baixos campos, porém sem introduzir AC's de níveis no espectro FD. Quando todos esses termos são simultaneamente levados em conta, vimos que o termo H_D^L desloca os campos críticos induzidos por H_R , além de ser capaz de separar em grupos os AC's relativos a um mesmo n . Mostramos ainda que quando o campo interfacial é bem aumentado, somos capazes de eliminar os *splittings* a campo nulo, de induzir uma enorme mistura ($|\sigma_z| < 0.5$) a campo zero mesmo nos estados de menor energia do PQ, além de fazer surgir os AC's provocados pelo termo H_D^C .

Para o problema de dois elétrons na ilha, vimos que a interação direta aumenta a energia dos estados e que a interação de troca também provoca *splittings* a campo nulo; a energia SO age contra a interação direta, diminuindo a energia dos estados de 2-elétrons. O fato interessante é que, diferentemente do que ocorre no problema de partícula isolada, o estado fundamental do sistema interagente também exhibe anticruzamento, onde processos intrínsecos de relaxação *spin-flip* ocorrem. Por tal estado ser mais acessível, assim como pelo fato de que tanto o campo crítico onde o AC ocorre, como o tamanho do mini-*gap* aberto nesse campo, serem funções dos

parâmetros do material e do sistema, esperamos que o estudo desenvolvido nessa tese venha a servir de incentivo para uma busca experimental dos resultados aqui apontados.

Na seqüência deste trabalho, pretendemos abordar os efeitos dos distintos tipos de interação SO, assim como do campo magnético e da interação elétron-elétron, no espectro de energia de PQ's parabólicos acoplados tanto verticalmente como horizontalmente; o trato da corrente eletrônica nesses sistemas também é nosso interesse. Para a obtenção do espectro pretendemos adaptar as abordagens de Roothaan e Pople-Nesbet para essa geometria, e assim poder tratar em princípio ilhas com qualquer ocupação eletrônica; já para o cálculo da corrente, devemos adaptar a equação mestre para esse sistema e entender como será possível extrair informação acerca das duas polarizações possíveis para a corrente. A base gaussiana será interessante para o trato de PQ's acoplados pois com ela podemos considerar funções gaussianas centradas em distintas ilhas. O cálculo da corrente nesses sistemas, para ilhas constituídas tanto por materiais de gap largo e estreito, com e sem estrutura zincblende, permitirá verificar a possibilidade atual da confecção de filtros de spin baseados em PQ's semicondutores.

Apêndice A

Taxas de transição

Mostramos nesse Apêndice os cálculos de teoria de perturbação dependente do tempo, em primeira ordem, para a obtenção das taxas de transição eletrônica entre os autoestados de muitos elétrons de um ponto quântico. Repetimos algumas das equações já apresentadas na tese para uma leitura mais contínua.

A.1 Regra de Ouro de Fermi

Do Hamiltoniano original, $H = H_0 + H_P$, H_0 é a parte estacionária da equação de Schrödinger,

$$H_0 |\Psi^{(0)}\rangle = E_i^{(0)} |\Psi^{(0)}\rangle , \quad (\text{A.1})$$

dado por

$$H_0 = H_{PQ} + H_F + H_D + H_E \quad (\text{A.2})$$

e que contém, respectivamente, os Hamiltonianos do ponto quântico, dos fônons, do canal direito e do canal esquerdo, os quais são completamente desacoplados no problema não perturbado. Cada um dos autoestados do sistema,

$$|\Psi^{(0)}\rangle = |\Psi_{PQ}\rangle \otimes |\Psi_E\rangle \otimes |\Psi_D\rangle \otimes |\Psi_F\rangle , \quad (\text{A.3})$$

é um produto tensorial dos vetores de estado descrevendo respectivamente o PQ, os canais esquerdo e direito e os fônons, tendo como autovalor

$$E^{(0)} = E_{PQ} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^E + \varepsilon_{\mathbf{k}}^D + \hbar\omega_{\mathbf{q}}, \quad (\text{A.4})$$

onde E_{PQ} descreve o espectro de N -partículas do sistema, e as autoenergias são aditivas por causa do desacoplamento de H_0 . Cada termo da Eq. A.2 age em seu respectivo estado na Eq. A.3, fornecendo sua respectiva energia na Eq. A.4.

Por sua vez,

$$H_P = H_E^T + H_D^T + H_{EF}, \quad (\text{A.5})$$

o qual contém, respectivamente, os Hamiltonianos de tunelamento entre o PQ e o canal esquerdo, entre o PQ e o canal direito, além da interação elétron-fônon dentro da ilha, é a parte de H que será tratada como perturbação ao sistema desacoplado representado por H_0 . Da Regra de Ouro de Fermi temos

$$\gamma_{j,i} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_j^{(0)} | H_P | \Psi_i^{(0)} \rangle \right|^2 \delta(E_j^{(0)} - E_i^{(0)}) \quad (\text{A.6})$$

como a taxa de transição eletrônica entre um estado final j e um estado inicial i do sistema.

Os componentes de H_P provocam três tipos de transições possíveis, detalhadas a seguir. Os termos de tunelamento podem ser escritos como $H_{E(D)}^T = H_{E(D)}^{T-} + H_{E(D)}^{T+}$, onde

$$H_{E(D)}^{T-} = \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} \left(T_{\mathbf{k}, \alpha}^{E(D)} \right) c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma}^+ c_{\alpha, \sigma} \quad (\text{A.7})$$

descreve o tunelamento de elétrons para fora do PQ, provocando uma diminuição em sua ocupação eletrônica, e

$$H_{E(D)}^{T+} = \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} \left(T_{\mathbf{k}, \alpha}^{E(D)} \right)^* c_{\alpha, \sigma}^+ c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma} \quad (\text{A.8})$$

expressa o tunelamento de elétrons para dentro do PQ, causando um aumento em sua ocupação eletrônica. Já o termo de interação elétron-fônon pode ser separado como $H_{EF} = H_{EF}^- + H_{EF}^+$, onde

$$H_{EF}^+ = \sum_{\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2, \sigma} \sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} c_{\alpha_1, \sigma}^+ c_{\alpha_2, \sigma} a_{\mathbf{q}}^+ \quad (\text{A.9})$$

descreve uma transição entre estados do PQ envolvendo emissão de um fônon, e

$$H_{EF}^- = \sum_{\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2, \sigma} \sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} c_{\alpha_1, \sigma}^+ c_{\alpha_2, \sigma} a_{\mathbf{q}} \quad (\text{A.10})$$

representa uma transição entre estados do PQ envolvendo absorção de um fônon; porém, estes dois últimos termos não alteram a ocupação eletrônica da ilha.

A.2 Transições com redução do número eletrônico

Para o caso em que um elétron tunela da ilha para os canais, o elemento matricial da Eq. A.6 se torna, através das Eqs. A.3 e A.7,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_j^{(0)} | H_{E(D)}^{T-} | \Psi_i^{(0)} \rangle &= \langle \Psi_{PQ_j} | \langle \Psi_{E_j} | \langle \Psi_{D_j} | \langle \Psi_{F_j} | \left| \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} \left(T_{\mathbf{k}, \alpha}^{E(D)} \right) c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma}^+ c_{\alpha, \sigma} \right| \\ &\quad | \Psi_{PQ_i} \rangle | \Psi_{E_i} \rangle | \Psi_{D_i} \rangle | \Psi_{F_i} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} \left(T_{\mathbf{k}, \alpha}^{E(D)} \right) \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha, \sigma} | \Psi_{PQ_i} \rangle \langle \Psi_{E(D)_j} | c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma}^+ | \Psi_{E(D)_i} \rangle \\ &\quad \langle \Psi_{D(E)_j} | \Psi_{D(E)_i} \rangle \langle \Psi_{F_j} | \Psi_{F_i} \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

As taxas efetivas de transição Γ_{PQ_j, PQ_i} entre estados do PQ são obtidas em dois passos: primeiro, somamos sobre todos os estados finais dos canais assumidos acoplados à reservatórios térmicos e aos fônons e, em seguida, os elementos matriciais dos estados iniciais dos canais e dos fônons são calculados assumindo-se equilíbrio térmico, ou seja,

$$\Gamma_{PQ_j, PQ_i} = \left\langle \sum_{E_j, D_j, F_j} \gamma_{j,i} \right\rangle_{term(E_i, D_i, F_i)} . \quad (\text{A.12})$$

Das Eqs. A.6, A.11 e A.12, obtemos então para o caso de redução de elétrons no PQ

$$\begin{aligned} \Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{E(D)-} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{E_j, D_j, F_j} \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \langle \left(T_{\mathbf{k}, \alpha}^{E(D)} \right)^* \left(T_{\mathbf{k}', \alpha'}^{E(D)} \right) \langle \Psi_{PQ_i} | c_{\alpha, \sigma}^+ | \Psi_{PQ_j} \rangle \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha', \sigma'} | \Psi_{PQ_i} \rangle \\ &\quad \langle \Psi_{E(D)_i} | c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma} | \Psi_{E(D)_j} \rangle \langle \Psi_{E(D)_j} | c_{E(D); \mathbf{k}', \sigma'}^+ | \Psi_{E(D)_i} \rangle \langle \Psi_{D(E)_i} | \Psi_{D(E)_j} \rangle \\ &\quad \langle \Psi_{D(E)_j} | \Psi_{D(E)_i} \rangle \langle \Psi_{F_i} | \Psi_{F_j} \rangle \langle \Psi_{F_j} | \Psi_{F_i} \rangle \rangle_{term(E_i, D_i, F_i)} \delta(E_j^{(0)} - E_i^{(0)}) . \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

No entanto, o conjunto de autofunções ortonormais $|\Psi_{E(D)}\rangle$ de $H_{E(D)}$ é completo, e com isso a soma sobre estados finais dos canais resulta em matrizes identidade, assim como os dois últimos fatores na Eq. A.13, pois nem os canais e nem os fônons são afetados pelos processos totais. A expressão para o equilíbrio térmico do operador número de ocupação da ilha é

$$\left\langle \left\langle \Psi_{E(D);i} \left| c_{E(D);k,\sigma} c_{E(D);k',\sigma'}^\dagger \right| \Psi_{E(D);i} \right\rangle \right\rangle_{term(E_i,D_i)} = \left(1 - f_{E(D)}(\varepsilon_{k,\sigma}^{E(D)}) \right) \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'} , \quad (\text{A.14})$$

em que a função distribuição de Fermi-Dirac $f_{E(D)}(\varepsilon_{k,\sigma}^{E(D)})$ contém a temperatura e o potencial químico do respectivo canal. Ainda, através da Eq. A.4, o argumento da função delta fica

$$E_j^{(0)} - E_i^{(0)} = E_{PQ_j} + \varepsilon_{k_E,\sigma}^{E(D)} - E_{PQ_i} , \quad (\text{A.15})$$

onde selecionamos o valor $\mathbf{k} = \mathbf{k}_E$ para o vetor de onda nos canais, com $\sigma = \pm 1/2$. Com essas considerações, a Eq. A.13 se torna

$$\Gamma_{PQ_j,PQ_i}^{E(D)-} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\alpha,\sigma} \left(T_{k_E,\alpha}^{E(D)} \right) \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha,\sigma} | \Psi_{PQ_i} \rangle \right|^2 \frac{\rho_{E(D)}(E)}{2} [1 - f_{E(D)}(E)] , \quad (\text{A.16})$$

onde $E = E_{PQ_i} - E_{PQ_j}$ é a energia do elétron tunelante, $\rho_{E(D)}(E)$ é a densidade eletrônica de estados do respectivo canal, e o fator 1/2 surge por causa da degenerescência de *spin*.

A.3 Transições com aumento do número eletrônico

Para o caso em que um elétron tunela dos canais para a ilha, o elemento matricial da Eq. A.6 se torna, através das Eqs. A.3 e A.8,

$$\begin{aligned} \left\langle \Psi_j^{(0)} \left| H_{E(D)}^{T+} \right| \Psi_i^{(0)} \right\rangle &= \langle \Psi_{PQ_j} | \langle \Psi_{E_j} | \langle \Psi_{D_j} | \langle \Psi_{F_j} | \left| \sum_{\mathbf{k},\alpha,\sigma} \left(T_{\mathbf{k},\alpha}^{E(D)} \right)^* c_{\alpha,\sigma}^\dagger c_{E(D);k,\sigma} \right| \\ &\quad | \Psi_{PQ_i} \rangle | \Psi_{E_i} \rangle | \Psi_{D_i} \rangle | \Psi_{F_i} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k},\alpha,\sigma} \left(T_{\mathbf{k},\alpha}^{E(D)} \right)^* \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha,\sigma}^\dagger | \Psi_{PQ_i} \rangle \langle \Psi_{E(D);j} | c_{E(D);k,\sigma} | \Psi_{E(D);i} \rangle \\ &\quad \langle \Psi_{D(E);j} | \Psi_{D(E);i} \rangle \langle \Psi_{F_j} | \Psi_{F_i} \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Usando agora as Eqs. A.6, A.12 e A.17, obtemos para o caso de aumento de elétrons no PQ

$$\begin{aligned} \Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{E(D)+} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{E_j, D_j, F_j} \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \langle (T_{\mathbf{k}, \alpha}^{E(D)}) (T_{\mathbf{k}', \alpha'}^{E(D)})^* \langle \Psi_{PQ_i} | c_{\alpha, \sigma} | \Psi_{PQ_j} \rangle \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha', \sigma'}^+ | \Psi_{PQ_i} \rangle \\ &\langle \Psi_{E(D)_i} | c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma}^+ | \Psi_{E(D)_j} \rangle \langle \Psi_{E(D)_j} | c_{E(D); \mathbf{k}', \sigma'} | \Psi_{E(D)_i} \rangle \langle \Psi_{D(E)_i} | \Psi_{D(E)_j} \rangle \\ &\langle \Psi_{D(E)_j} | \Psi_{D(E)_i} \rangle \langle \Psi_{F_i} | \Psi_{F_j} \rangle \langle \Psi_{F_j} | \Psi_{F_i} \rangle \rangle_{term(E_i, D_i, F_i)} \delta(E_j^{(0)} - E_i^{(0)}) . \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

A partir dos mesmos argumentos usados no caso de redução de elétrons, mas sendo agora a expressão para o equilíbrio térmico do operador número de ocupação da ilha dada por

$$\left\langle \left\langle \Psi_{E(D)_i} | c_{E(D); \mathbf{k}, \sigma}^+ c_{E(D); \mathbf{k}', \sigma'} | \Psi_{E(D)_i} \right\rangle \right\rangle_{term(E_i, D_i)} = f_{E(D)}(\varepsilon_{\mathbf{k}, \tilde{\sigma}}^{E(D)}) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'} , \quad (\text{A.19})$$

a expressão para o aumento do número de elétrons da Eq. A.18 fica

$$\Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{E(D)+} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\alpha, \sigma} (T_{\mathbf{k}, \alpha}^{E(D)})^* \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha, \sigma}^+ | \Psi_{PQ_i} \rangle \right|^2 \frac{\rho_{E(D)}(E)}{2} f_{E(D)}(E) . \quad (\text{A.20})$$

A.4 Transições com conservação do número eletrônico

A interação elétron-fônon causa dois tipos de processos de transição que não alteram a ocupação eletrônica do PQ, um envolvendo a emissão e outro a absorção de um fônon.

Para o caso de absorção de um fônon, o elemento matricial da Eq. A.6 se torna, através das Eqs. A.3 e A.10,

$$\begin{aligned} \left\langle \Psi_j^{(0)} \left| H_{EF}^- \right| \Psi_i^{(0)} \right\rangle &= \langle \Psi_{PQ_j} | \langle \Psi_{E_j} | \langle \Psi_{D_j} | \langle \Psi_{F_j} | \left| \sum_{\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2, \sigma} \sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} c_{\alpha_1, \sigma}^+ c_{\alpha_2, \sigma} a_{\mathbf{q}} \right| \\ &| \Psi_{PQ_i} \rangle | \Psi_{E_i} \rangle | \Psi_{D_i} \rangle | \Psi_{F_i} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2, \sigma} \sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha_1, \sigma}^+ c_{\alpha_2, \sigma} | \Psi_{PQ_i} \rangle \langle \Psi_{E_j} | \Psi_{E_i} \rangle \\ &\langle \Psi_{D_j} | \Psi_{D_i} \rangle \langle \Psi_{F_j} | a_{\mathbf{q}} | \Psi_{F_i} \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Das Eqs. A.6, A.12 e A.21 obtemos

$$\begin{aligned}
\Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{F-} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{E_j, D_j, F_j} \sum_{\alpha_1, \alpha_1'} \sum_{\alpha_2, \alpha_2'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \langle \sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} \sqrt{g(\mathbf{q}', \alpha_1', \alpha_2')} \\
&\langle \Psi_{PQ_i} | c_{\alpha_2, \sigma} c_{\alpha_1, \sigma}^+ | \Psi_{PQ_j} \rangle \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha_1', \sigma'}^+ c_{\alpha_2', \sigma'} | \Psi_{PQ_i} \rangle \langle \Psi_{E_i} | \Psi_{E_j} \rangle \\
&\langle \Psi_{E_j} | \Psi_{E_i} \rangle \langle \Psi_{D_i} | \Psi_{D_j} \rangle \langle \Psi_{D_j} | \Psi_{D_i} \rangle \langle \Psi_{F_i} | a_{\mathbf{q}}^+ | \Psi_{F_j} \rangle \\
&\langle \Psi_{F_j} | a_{\mathbf{q}'} | \Psi_{F_i} \rangle \rangle_{term(E_i, D_i, F_i)} \delta(E_j^{(0)} - E_i^{(0)}) .
\end{aligned} \tag{A.22}$$

A partir dos mesmos argumentos anteriores, e com a expressão para o equilíbrio térmico

$$\langle \langle \Psi_{F_i} | a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}'} | \Psi_{F_i} \rangle \rangle_{term(Q_i)} = n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}}) \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} , \tag{A.23}$$

onde $n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}})$ é a função distribuição de Bose-Einstein contendo a temperatura do banho térmico bosônico e $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ é a energia do fônon de vetor de onda \mathbf{q} envolvido no processo, a Eq. A.22 para o processo de absorção se torna

$$\Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{F-} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \sigma} \sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha_1, \sigma}^+ c_{\alpha_2, \sigma} | \Psi_{PQ_i} \rangle \right|^2 \rho_F(\hbar\omega_{\mathbf{q}}) n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}}) , \tag{A.24}$$

onde $\rho_F(\hbar\omega_{\mathbf{q}})$ é a densidade de estados de fônons na ilha.

Para o caso de emissão de um fônon, o elemento matricial da Eq. A.6 fica, usando-se as Eqs. A.3 e A.9,

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_j^{(0)} | H_{EF}^+ | \Psi_i^{(0)} \rangle &= \langle \Psi_{PQ_j} | \langle \Psi_{E_j} | \langle \Psi_{D_j} | \langle \Psi_{F_j} | \left| \sum_{\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2, \sigma} \sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} c_{\alpha_1, \sigma}^+ c_{\alpha_2, \sigma} a_{\mathbf{q}}^+ \right| \\
&| \Psi_{PQ_i} \rangle | \Psi_{E_i} \rangle | \Psi_{D_i} \rangle | \Psi_{F_i} \rangle \\
&= \sum_{\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2, \sigma} \sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha_1, \sigma}^+ c_{\alpha_2, \sigma} | \Psi_{PQ_i} \rangle \langle \Psi_{E_j} | \Psi_{E_i} \rangle \\
&\langle \Psi_{D_j} | \Psi_{D_i} \rangle \langle \Psi_{F_j} | a_{\mathbf{q}}^+ | \Psi_{F_i} \rangle .
\end{aligned} \tag{A.25}$$

Com o uso das Eqs. A.6, A.12 e A.25 obtemos

$$\begin{aligned}
\Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{F+} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{E_j, D_j, F_j} \sum_{\alpha_1, \alpha_1'} \sum_{\alpha_2, \alpha_2'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \langle \sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} \sqrt{g(\mathbf{q}', \alpha_1', \alpha_2')} \\
&\langle \Psi_{PQ_i} | c_{\alpha_2, \sigma} c_{\alpha_1, \sigma}^+ | \Psi_{PQ_j} \rangle \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha_1', \sigma'}^+ c_{\alpha_2', \sigma'} | \Psi_{PQ_i} \rangle \langle \Psi_{E_i} | \Psi_{E_j} \rangle \\
&\langle \Psi_{E_j} | \Psi_{E_i} \rangle \langle \Psi_{D_i} | \Psi_{D_j} \rangle \langle \Psi_{D_j} | \Psi_{D_i} \rangle \langle \Psi_{F_i} | a_{\mathbf{q}} | \Psi_{F_j} \rangle \\
&\langle \Psi_{F_j} | a_{\mathbf{q}'}^+ | \Psi_{F_i} \rangle \rangle_{term(E_i, D_i, F_i)} \delta(E_j^{(0)} - E_i^{(0)}) .
\end{aligned} \tag{A.26}$$

Através dos mesmos argumentos usados até aqui, mas sendo agora a expressão para o equilíbrio térmico

$$\left\langle \langle \Psi_{F_i} | a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}'}^+ | \Psi_{F_i} \rangle \right\rangle_{term(Q_i)} = [1 + n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}})] \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}, \tag{A.27}$$

a Eq. A.26 para o processo de emissão fica

$$\Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{F+} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \sigma} \sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha_1, \sigma}^+ c_{\alpha_2, \sigma} | \Psi_{PQ_i} \rangle \right|^2 \rho_F(\hbar\omega_{\mathbf{q}}) [1 + n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}})] . \tag{A.28}$$

A.5 Aproximações

Para simplificar os cálculos e ter uma boa noção qualitativa dos resultados, fazemos algumas aproximações nas taxas efetivas de transição presentes nas Eqs. A.16, A.20, A.24 e A.28.

Primeiramente, nas Eqs. A.16 e A.20, negligenciamos a dependência da densidade de estados eletrônicos com a energia e a dependência dos elementos da matriz de tunelamento com os estados eletrônicos, ou seja, assumimos $T_{\mathbf{k}, \alpha}^{E(D)} \equiv T^{E(D)}$ e definimos a quantidade

$$t^{E(D)} \equiv \frac{2\pi}{\hbar} |T^{E(D)}|^2 \rho_{E(D)}(E); \tag{A.29}$$

com isso, as Eqs. A.16 e A.20 para transições envolvendo redução e aumento do número eletrônico no PQ ficam, respectivamente,

$$\Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{E(D)-} = \frac{t^{E(D)}}{2} [1 - f_{E(D)}(E)] \left| \sum_{\alpha, \sigma} \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha, \sigma} | \Psi_{PQ_i} \rangle \right|^2 \delta_{N_j, N_i-1}, \tag{A.30}$$

$$\Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{E(D)+} = \frac{t^{E(D)}}{2} [f_{E(D)}(E)] \left| \sum_{\alpha, \sigma} \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha, \sigma}^+ | \Psi_{PQ_i} \rangle \right|^2 \delta_{N_j, N_i+1}. \tag{A.31}$$

Finalmente, nas Eqs. A.24 e A.28, negligenciamos a dependência da densidade de estados bosônicos com a energia e a dependência do termo de acoplamento com os estados eletrônicos e bosônicos, ou seja, assumimos $\sqrt{g(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)} \equiv \sqrt{g}$ e definimos a quantidade

$$r \equiv \frac{2\pi}{\hbar} g \rho_F(\hbar\omega_{\mathbf{q}}) , \quad (\text{A.32})$$

com a qual as Eqs. A.24 e A.28 para transições envolvendo absorção e emissão de um fônon no PQ, sem que se mude sua ocupação eletrônica, ficam, respectivamente,

$$\Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{F-} = r [n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}})] \left| \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \sigma} \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha_1, \sigma}^+ c_{\alpha_2, \sigma} | \Psi_{PQ_i} \rangle \right|^2 \delta_{N_j, N_i} , \quad (\text{A.33})$$

$$\Gamma_{PQ_j, PQ_i}^{F+} = r [1 + n_B(\hbar\omega_{\mathbf{q}})] \left| \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \sigma} \langle \Psi_{PQ_j} | c_{\alpha_1, \sigma}^+ c_{\alpha_2, \sigma} | \Psi_{PQ_i} \rangle \right|^2 \delta_{N_j, N_i} . \quad (\text{A.34})$$

As Eqs. A.30, A.31, A.33 e A.34 reproduzem assim as Eqs. 2.7-2.10 e fornecem a matriz completa das taxas efetivas de transição entre os autoestados de muitos elétrons do PQ, $\Gamma = \Gamma^{E+} + \Gamma^{D+} + \Gamma^{E-} + \Gamma^{D-} + \Gamma^{F+} + \Gamma^{F-}$.

Apêndice B

Acoplamentos *spin*-órbita

Mostramos nesse Apêndice a dedução dos termos presentes nos Hamiltonianos *spin*-órbita AIE e AIB. Como eles são escritos em coordenadas cilíndricas, ao lidarmos com os termos AIE usaremos as identidades

$$\begin{aligned}x &= \rho \cos \phi , \\y &= \rho \text{sen} \phi , \\(x \mp iy) &= \rho L_{\mp} , \\x^2 + y^2 &= \rho^2 , \\ \frac{\partial}{\partial x} &= \cos \phi \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{i}{\rho} \text{sen} \phi L_z , \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \text{sen} \phi \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \cos \phi L_z , \\ \left(\frac{\partial}{\partial x} \mp i \frac{\partial}{\partial y} \right) &= L_{\mp} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \pm \frac{L_z}{\rho} \right) ,\end{aligned} \tag{B.1}$$

onde $L_{\mp} = e^{\mp i\phi}$ e $L_z = -i\partial/\partial\phi$; quando tratarmos especificamente dos termos AIB, as identidades

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \cos^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{\sin^2 \phi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\sin^2 \phi}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\sin(2\phi)}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \phi} , \\
\frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \sin^2 \phi \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{\cos^2 \phi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos^2 \phi}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - \frac{\sin(2\phi)}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \phi} , \\
\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) &= \cos(2\phi) \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \sin(2\phi) \frac{2}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \phi} , \\
\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) &= \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} , \\
y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} &= \rho \sin(2\phi) \frac{\partial}{\partial \rho} + \cos(2\phi) \frac{\partial}{\partial \phi} , \\
x^2 - y^2 &= \rho^2 \cos(2\phi) ,
\end{aligned} \tag{B.2}$$

também serão úteis.

B.1 Termos AIE

O Hamiltoniano AIE, $H_{AIE} = \alpha \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \mathbf{k})$, é explicitado como

$$H_{AIE} = \alpha \left[\sigma_x \left(m\omega_0^2 y k_z - \frac{dV}{dz} k_y \right) + \sigma_y \left(\frac{dV}{dz} k_x - m\omega_0^2 x k_z \right) + \sigma_z m\omega_0^2 (x k_y - y k_x) \right] , \tag{B.3}$$

já que $V(\mathbf{r}) = m\omega_0^2(x^2 + y^2)/2 + V(z)$; optamos em considerar um $V(z)$ geral. Podemos reescrever tal equação como

$$H_{AIE} = \alpha \left[m\omega_0^2 (\sigma_x y - \sigma_y x) k_z - \frac{dV}{dz} (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + m\omega_0^2 \sigma_z (x k_y - y k_x) \right] \tag{B.4}$$

e, tendo em mente que $\sigma_x = \sigma_+ + \sigma_-$ e $\sigma_y = -i(\sigma_+ - \sigma_-)$, podemos ainda reescrevê-la como

$$\begin{aligned}
H_{AIE} &= \alpha \left[m\omega_0^2 [\sigma_+ (y + ix) + \sigma_- (y - ix)] k_z - \frac{dV}{dz} [\sigma_+ (k_y + ik_x) + \sigma_- (k_y - ik_x)] \right. \\
&\quad \left. + m\omega_0^2 \sigma_z (x k_y - y k_x) \right] .
\end{aligned} \tag{B.5}$$

O operador momento $\mathbf{k} = -i\nabla + e\mathbf{A}/(\hbar c)$, no *gauge* simétrico, possui componentes $\mathbf{k} = (-i\partial/\partial x - y/(2l_B^2), -i\partial/\partial y + x/(2l_B^2), k_z)$, com $l_B^2 = \hbar c/(eB_0)$; substituindo-o na última equação

encontramos

$$\begin{aligned}
H_{AIE} = & \alpha m \omega_0^2 i [\sigma_+ (x - iy) - \sigma_- (x + iy)] k_z + \alpha m \omega_0^2 \sigma_z \left(-ix \frac{\partial}{\partial y} + iy \frac{\partial}{\partial x} + \frac{x^2 + y^2}{2l_B^2} \right) \\
& - \alpha \frac{dV}{dz} \left[\sigma_+ \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} + \frac{x - iy}{2l_B^2} \right) - \sigma_- \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} - \frac{x + iy}{2l_B^2} \right) \right]. \quad (B.6)
\end{aligned}$$

Inserindo-se agora as identidades da Eq. B.1, usando-se o comutador $[x, p_y]_- = -ix\partial/\partial y + iy\partial/\partial x = L_z$ e tomando-se a média do momento na direção z , o Hamiltoniano AIE se torna finalmente

$$\begin{aligned}
H_{AIE} = & \alpha m \omega_0^2 i \rho (\sigma_+ L_- - \sigma_- L_+) \langle k_z \rangle + \alpha m \omega_0^2 \sigma_z \left(L_z + \frac{\rho^2}{2l_B^2} \right) \\
& - \alpha \frac{dV}{dz} \left[\sigma_+ L_- \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{L_z}{\rho} + \frac{\rho}{2l_B^2} \right) + \sigma_- L_+ \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{L_z}{\rho} + \frac{\rho}{2l_B^2} \right) \right]. \quad (B.7)
\end{aligned}$$

Ao reescrevermos a última expressão em forma adimensional, com ρ em unidades de λ e H_{AIE} em unidades de $\hbar\Omega$, encontramos os componentes H_K , H_{AIE}^D e H_R do Hamiltoniano AIE usadas na tese.

B.2 Termos AIB

Vamos tratar os componentes do Hamiltoniano AIB já de forma separada. O termo linear, $H_D^L = \gamma \langle k_z^2 \rangle [\sigma_y k_y - \sigma_x k_x]$, tem um desenvolvimento muito similar ao termo $-\alpha dV/dz (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)$ da Eq. B.4; por isso, achamos razoável não reproduzi-lo aqui. O termo quadrático, $H_D^Q = \gamma \sigma_z \langle k_z \rangle (k_x^2 - k_y^2)$ fica, após a substituição do operador momento,

$$H_D^Q = \gamma \sigma_z \langle k_z \rangle \left[- \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + i \left(x \frac{\partial}{\partial y} + y \frac{\partial}{\partial x} \right) - \frac{x^2 - y^2}{4l_B^4} \right]. \quad (B.8)$$

Após a inserção das identidades da Eq. B.2 em H_D^Q encontramos

$$\begin{aligned}
H_D^Q = & \gamma \sigma_z \langle k_z \rangle \left[i \text{sen}(2\phi) \left(\frac{\rho}{l_B^2} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{2L_z}{\rho^2} \right) \right. \\
& \left. + \cos(2\phi) \left(-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{L_z^2}{\rho^2} - \frac{\rho^2}{4l_B^4} - \frac{L_z}{l_B^2} \right) \right]. \quad (B.9)
\end{aligned}$$

Escrevendo as funções trigonométricas em termos de L_{\pm} , H_D^Q se torna

$$H_D^Q = \gamma \sigma_z \langle k_z \rangle \left[L_+^2 \left(\left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} + \frac{\rho}{l_B^2} \right) \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} - \left(\frac{2}{\rho^2} + \frac{L_z}{\rho^2} + \frac{1}{l_B^2} \right) \frac{L_z}{2} - \frac{\rho^2}{8l_B^4} \right) \right. \\ \left. + L_-^2 \left(\left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} - \frac{\rho}{l_B^2} \right) \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} - \left(-\frac{2}{\rho^2} + \frac{L_z}{\rho^2} + \frac{1}{l_B^2} \right) \frac{L_z}{2} - \frac{\rho^2}{8l_B^4} \right) \right]; \quad (\text{B.10})$$

quando escrevemos essa equação em forma adimensional, obtemos a expressão apresentada na tese para H_D^Q .

O termo cúbico, $H_D^C = \gamma [\sigma_x k_x k_y^2 - \sigma_y k_y k_x^2]$, é tratado da mesma maneira, com o uso das identidades apropriadas. No entanto, preferimos não entrar nos detalhes aqui, pois os cálculos envolvidos são relativamente extensos.

Referências

- [1] W. Jaskólski, Phys. Rep. **271**, 1 (1996).
- [2] J. P. Connerade, V. K. Dolmatov, P. A. Lakshmit, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **33**, 251 (2000).
- [3] M. Grinberg, W. Jaskólski, Cz. Koepke, J. Planelles, M. Janowicz, Phys. Rev. B **50**, 6504 (1994).
- [4] V. Gudmundson, R. R. Gerhardtts, Phys. Rev. B **43**, 12098 (1991).
- [5] M. Grossmann, M. Holthaus, Z. Phys. B **97**, 319 (1995).
- [6] M. A. Kastner, Rev. Mod. Phys. **64**, 849 (1992).
- [7] K. K. Likharev, T. Claeson, Scientific American, June, 50 (1992).
- [8] M. A. Kastner, Physics Today, January, 24 (1993).
- [9] M. A. Reed, Scientific American, January, 98 (1993).
- [10] B. Jouault, M. Boero, G. Faini, J. C. Inkson, Phys. Rev. B **59**, 4966 (1999).
- [11] A. D. Güçlü, Q. F. Sun, H. Guo, R. Harris, Phys. Rev. B **66**, 195327 (2002).
- [12] M. A. Reed, J. N. Randall, R. J. Aggarwal, R. J. Matyi, T. M. Moore, A. E. Wetsel, Phys. Rev. Lett. **60**, 535 (1988).
- [13] A. T. Johnson, L. P. Kouwenhoven, W. de Jong, N. C. van der Vaart, C. J. P. M. Harmans, C. T. Foxon, Phys. Rev. Lett. **69**, 1592 (1992).
- [14] K. Kang, B. I. Min, Phys. Rev. B **55**, 15412 (1997).

- [15] E. B. Foxman, P. L. McEuen, U. Meirav, N. S. Wingreen, Y. Meir, P. A. Belk, N. R. Belk, M. A. Kastner, S. J. Wind, *Phys. Rev. B* **47**, 10 020 (1993).
- [16] D. V. Averin, A. N. Korothov, K. K. Likharev, *Phys. Rev. B* **44**, 6199 (1991).
- [17] C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **44**, 1646 (1991).
- [18] H. Grabert, *Z. Phys. B* **85**, 319 (1991).
- [19] L. P. Kouwenhoven, N. C. van der Vaart, A. T. Johnson, W. Kool, C. J. P. M. Harmans, J. G. Williamson, A. A. M. Staring, C. T. Foxon, *Z. Phys. B* **85**, 367 (1991).
- [20] Y. Meir, N. S. Wingreen, P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 3048 (1991).
- [21] K. Jauregui, W. Häusler, D. Weinmann, B. Kramer, *Phys. Rev. B* **53**, R1713 (1996).
- [22] W. Häusler, *Z. Phys. B* **99**, 551 (1996).
- [23] W. Häusler, B. Kramer, J. Masek, *Z. Phys. B* **85**, 435 (1991).
- [24] W. Häusler, B. Kramer, *Phys. Rev. B* **47**, 16353 (1993).
- [25] W. Pfaff, D. Weinmann, W. Häusler, B. Kramer, U. Weiss, *Z. Phys. B* **96**, 201 (1994).
- [26] D. Pfannkuche, S. E. Ulloa, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1194 (1995).
- [27] D. Pfannkuche, S. E. Ulloa, *Advances in Solid State Physics* **35** (Vieweg, Braunschweig, 1996).
- [28] A. Yacoby, M. Heiblum, D. Mahalu, H. Shtrikman, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4047 (1995).
- [29] A. Okiji, H. Kasai, A. Nakamura, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **106**, 209 (1991).
- [30] A. Knäbchen, *Phys. Rev. B* **57**, 14630 (1998).
- [31] H. Grabert, M. Devoret, *Single Charge Tunneling*, NATO Series **294** (Plenum Press, New York, 1992).
- [32] K. Jauregui, W. Häusler, B. Kramer, *Europhys. Lett.* **24**, 581 (1993).
- [33] S. M. Riemann, M. Koskinen, M. MAanninen, *Phys. Rev. B* **62**, 8108 (2000).

- [34] D. Weinmann, W. Häusler, B. Kramer, *Ann. Phys.* **5**, 652 (1996).
- [35] G. Cipriani, M. Rosa-Clot, S. Taddei, *Phys. Rev. B* **61**, 7536 (2000).
- [36] J. Harting, O. Mülken, P. Borrmann, *Phys. Rev. B* **62**, 10207 (2000).
- [37] D. Pfannkuche, V. Gudmundsson, P. A. Maksym, *Phys. Rev. B* **47**, 2244 (1993).
- [38] Y. Alhassid, S. Malhotra, *Phys. Rev. B* **66**, 245313 (2002).
- [39] B. Reusch, H. Grabert, *Phys. Rev. B* **68**, 045309 (2003).
- [40] S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, *Phys. Rev. B* **59**, 13036 (1999).
- [41] M. Ferconi, G. Vignale, *Phys. Rev. B* **50**, 14722 (1994).
- [42] H. Akera, *Phys. Rev. B* **60**, 10683 (1999).
- [43] D. Weinmann, W. Häusler, W. Pfaff, B. Kramer, U. Weiss, *Europhys. Lett.* **26**, 467 (1994).
- [44] D. Weinmann, W. Häusler, B. Kramer, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 984 (1995).
- [45] C. E. Creffield, W. Häusler, J. H. Jefferson, S. Sarkar, *Phys. Rev. B* **59**, 10719 (1999)
- [46] C. E. Creffield, J. H. Jefferson, S. Sarkar, D. L. J. Tipton, *Phys. Rev. B* **62**, 7249 (2000).
- [47] S. Akbar, In-Ho Lee, *Phys. Rev. B* **63**, 165301 (2001).
- [48] W. D. Heiss, R. G. Nazmitdinov, *Phys. Rev. B* **55**, 16310 (1997).
- [49] Y. E. Lozovik, S. Y. Volkov, *Phys. Sol. Stat.* **45**, 364 (2003).
- [50] P. A. Sundqvist, S. Y. Volkov, Y. E. Lozovik, M. Willander, *Phys. Rev. B* **66**, 075335 (2002).
- [51] R. K. Pandey, M. K. Harbola, V. A. Singh, *Phys. Rev. B* **67**, 075315 (2003).
- [52] B. Szafran, J. Adamowski, S. Bednarek, *Physica E* **4**, 1 (1999).
- [53] V. Fock, *Z. Phys.* **47**, 446 (1928).
- [54] C. G. Darwin, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **27**, 86 (1931).

- [55] L. Jacak, A. Wojs, P. Hawrylak, *Quantum Dots* (Springer, Berlin, 1998).
- [56] R. C. Ashoori, H. L. Stormer, J. S. Weiner, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, K. W. West, Phys. Rev. Lett. **71**, 613 (1993).
- [57] S. Tarucha, D. G. Austing, T. Honda, R. J. van der Hage, L. P. Kouwenhoven, Phys. Rev. Lett. **77**, 3613 (1996).
- [58] D. J. Lockwood, P. Hawrylak, P. D. Wang, C. M. S. Torres, A. Pinczuk, B. S. Dennis, Phys. Rev. Lett. **77**, 354 (1996).
- [59] P. Hawrylak, C. Gould, A. Sachradja, Y. Feng, Z. Wasilewski, Phys. Rev. B **59**, 2801 (1999).
- [60] U. Merkt, J. Huser, M. Wagner, Phys. Rev. B **43**, 7320 (1991).
- [61] M. Dineykhon, R. G. Nazmitdinov, Phys. Rev. B **55**, 13707 (1997).
- [62] M. Wagner, U. Merkt, A. V. Chaplik, Phys. Rev. B **45**, 1951 (1992).
- [63] Jia-Lin Zhu, S. Zhu, Z. Zhu, Y. Kawazoe, T. Yao, Phys. Lett. A **246**, 157 (1998).
- [64] R. Rinaldi, P. V. Giugno, R. Cingolani, H. Lipsanen, M. Sopanen, J. Tulkki, J. Ahopelto, Phys. Rev. Lett. **77**, 342 (1996).
- [65] M. Rontani, F. Rossi, F. Manghi, E. Molinari, Phys. Rev. B **59**, 10165 (1999).
- [66] T. Kleimann, M. Sasseti, B. Kramer, A. Yacoby, Phys. Rev. B **62**, 8144 (2000).
- [67] S. M. Riemann, M. Manninen, Rev. Mod. Phys. **74**, 1283 (2002).
- [68] G. Dresselhaus, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).
- [69] Y. A. Bychkov, E. I. Rashba, J. Phys. C **17**, 6039 (1984).
- [70] D. K. Young, J. A. Gupta, E. Johnston-Halperin, R. Epstein, Y. Kato, D. D. Awschalom, Semicond. Sci. Technol. **17**, **275** (2002).
- [71] S. Datta, B. Das, Appli. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [72] S. Das Sarma, J. Fabian, X. Hu, I. Zutic, Superlat. Microst. **27**, 289 (2000).

- [73] E. I. Rashba, *J. Supercond.* **15**, 13 (2002).
- [74] S. A. Wolf, *J. Supercond.* **13**, 195 (2000).
- [75] D. Loss, D.P. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* **57**, 120 (1998).
- [76] S. Das Sarma, J. Fabian, X. Hu, I. Zutic, *Sol. Stat. Commun.* **119**, 207 (2001).
- [77] X. Hu, S. Das Sarma, *Phys. Rev. A* **64**, 042312 (2001).
- [78] N. S. Averkiev, L. E. Golub, M. Willander, *Semicond.* **36**, 91 (2002).
- [79] J. Fabian, S. Das Sarma, *J. Vac. Sci. Technol. B* **17**, 1708 (1999).
- [80] A. V. Khaestkii, Y. V. Nazarov, *Phys. Rev. B* **61**, 12639 (2000).
- [81] A. V. Khaestkii, Y. V. Nazarov, *Phys. Rev. B* **64**, 125316 (2001).
- [82] L. M. Woods, T. L. Reinecke, Y. Lyanda-Geller, *Phys. Rev. B* **66**, 161318 (2002).
- [83] E. G. Mishchenko, B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* **68**, 045317 (2003).
- [84] J. Schliemann, J. C. Egues, D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 146801 (2003).
- [85] E. A. A. Silva, G. C. La Rocca, F. Bassani, *Phys. Rev. B* **55**, 16293 (1997).
- [86] T. Hassenkam, S. Pedersen, K. Baklanov, A. Kristensen, C. B. Sorensen, P. E. Lindelof, F. G. Pikus, G. E. Pikus, *Phys. Rev. B* **55**, 9298 (1997).
- [87] E. A. A. Silva, G. C. La Rocca, F. Bassani, *Phys. Rev. B* **50**, 8523 (1994).
- [88] F. G. Pikus, G. E. Pikus, *Phys. Rev. B* **51**, 16928 (1995).
- [89] S. Gopalan, J. K. Furdyna, S. Rodriguez, *Phys. Rev. B* **32**, 903 (1985).
- [90] I. L. Aleiner, V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 256801 (2001).
- [91] J. B. Miller, D. M. Zumbühl, C. M. Marcus, Y. B. Lyanda-Geller, D. Goldhaber-Gordon, K. Campman, A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 076807 (2003).
- [92] M. Valín-Rodríguez, A. Puente, Llorenç Serra, *Phys. Rev. B* **66**, 045317 (2002).

- [93] M. Valín-Rodríguez, A. Puente, Llorenç Serra, E. Lipparini, Phys. Rev. B **66**, 165302 (2002).
- [94] M. Valín-Rodríguez, A. Puente, Llorenç Serra, E. Lipparini, Phys. Rev. B **66**, 235322 (2002).
- [95] M. Governale, Phys. Rev. Lett. **89**, 206802 (2002).
- [96] M. Cardona, N. E. Christensen, G. Fasol, Phys. Rev. B **38**, 1806 (1988).
- [97] C. Sikorski, U. Merkt, Phys. Rev. Lett. **62**, 2164 (1989).
- [98] W. Zawadzki, M. Kubisa, Semicond. Sci. Technol. **8**, S240 (1993).
- [99] P. Junker, U. Kops, U. Merkt, T. Darnhofer, U. Rössler, Phys. Rev. B **49**, 4794 (1994).
- [100] T. Darnhofer, U. Rössler, Phys. Rev. B **47**, 16020 (1993).
- [101] O. Voskoboynikov, C. P. Lee, O. Tretiyak, Phys. Rev. B **63**, 165306 (2001).
- [102] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, New York, 1995).
- [103] A. L. Fetter, J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, San Francisco, 1971).
- [104] E. U. Condon, G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra* (Cambridge University Press, London, 1977).
- [105] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists* (Academic Press, Orlando, 1985).
- [106] R. N. Zare, *Angular Momentum: Understanding Spatial Aspects in Chemistry and Physics* (John Wiley & Sons, New York, 1988).
- [107] C. C. J. Roothaan, Rev. Mod. Phys. **23**, 69 (1951).
- [108] J. A. Pople, R. K. Nesbet, J. Chem. Phys. **22**, 571 (1954).
- [109] A. Szabo, N. S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory* (Dover, New York, 1999).
- [110] R. Ditchfield, W. J. Hehre, J. A. Pople, J. Chem. Phys. **54**, 724 (1971).