

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

**ESTUDO DOS EFEITOS DA ORIENTAÇÃO DO
CAMPO MAGNÉTICO SOBRE A ESTRUTURA
ELETRÔNICA DE POÇOS QUÂNTICOS
SEMICONDUCTORES**

Johnni Xavier Padilha

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Leonardo Kleber Castelano

São Carlos - SP

Março de 2015

Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da Biblioteca Comunitária UFSCar
Processamento Técnico
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

P123e Padilha, Johnni Xavier
Estudo dos efeitos da orientação do campo magnético sobre a estrutura eletrônica de poços quânticos semicondutores / Johnni Xavier Padilha. -- São Carlos : UFSCar, 2015.
103 p.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2015.

1. Poços quânticos. 2. Campo magnético inclinado. 3. Estrutura eletrônica. 4. Modelo de Luttinger. 5. Desdobramento Zeeman. I. Título.



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Física

Folha de Aprovação

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Johnni Xavier Padilha, realizada em 27/03/2015:

Prof. Dr. Leonardo Kleber Castelano
UFSCar

Prof. Dr. Ronny Rocha Ribeiro
UFPR

Prof. Dr. Guo-Qiang Hai
USP

Dedico este trabalho aos meus pais, Noeli e Vergilio, pelo incentivo e liberdade de pensamento que possibilitaram minha chegada a esta etapa.

AGRADECIMENTOS

Ao professor Leonardo pela oportunidade, confiança, dedicação, paciência e entusiasmo demonstrados ao orientar esta pesquisa.

Ao professor Trallero, cujas ideias foram fundamentais na complementação do estudo da banda de condução.

Aos professores e pesquisadores do grupo, que de uma forma ou outra tiveram participação efetiva na pesquisa que deu origem a esta dissertação.

Aos professores Vivaldo e Farinas, pelas aulas de Física do Estado Sólido e Mecânica Quântica que me possibilitaram o aprendizado de conceitos fundamentais nesta pesquisa.

A todos os professores e funcionários do DF.

À minha esposa, Thaís, pelo companheirismo, coragem, apoio e carinho que me foram essenciais nesta jornada.

À minha mãe, Noeli, e minhas irmãs, Brenda, Bruna e Jehnnifer, essenciais na minha formação pessoal.

Aos meus sogros, Antônio e Nicéia, pelo apoio financeiro sem o qual não seria possível a vinda para São Carlos.

Aos amigos e colegas de São Carlos, Cesar, Edson, Emanuel, Leonardo (Zagaia), Mariama, Mariana, Pedro e Vivaldo, pelas discussões e conversas aleatórias durante as pausas para o café.

Aos professores da graduação, Ary, Eduardo, Fábio, Ney, Pedro Pablo, Ricardo, Rodrigo e Tânia, por me possibilitarem as primeiras experiências na área de pesquisa científica.

Aos amigos e colegas de graduação, Christian, Edson, Emanuel, Ezequiel, Felipe, João Carlos, João Paulo, Leomar e Paulo, parceiros no início da vida acadêmica.

Ao CNPq, pelo suporte financeiro, sem o qual não seria possível a realização deste trabalho.

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo determinar de maneira teórica, baseando-se no método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, o espectro de energia do mínimo da banda de condução e do topo da banda de valência de uma heteroestrutura de poço quântico baseada em arseneto de gálio, na presença de um campo magnético inclinado em relação à sua direção de crescimento, definida aqui por $\hat{\mathbf{z}}$. As bandas de condução e de valência são tratadas de maneira independente neste trabalho. Para a banda de condução, o Hamiltoniano de massa efetiva é utilizado nas configurações de campo magnético paralelo, perpendicular e inclinado em relação à direção de confinamento do poço quântico. A base que soluciona o problema orbital em $\theta = 0^\circ$ também é aplicada aos casos de campo magnético perpendicular ($\theta = 90^\circ$) e de campo inclinado, utilizando duas abordagens: (i) expansão e diagonalização da parte orbital do Hamiltoniano do sistema, e (ii) teoria de perturbação não-degenerada. O problema em que $\theta = 90^\circ$ também é abordado de maneira analítica, por meio de uma base composta de funções hipergeométricas confluentes. Verifica-se que os resultados obtidos pela abordagem (i) são equivalentes aos obtidos pelo método analítico para uma faixa ampla de valores de campo magnético e largura do poço quântico. Esta equivalência motiva a utilização da base, obtida para $\theta = 0^\circ$, no caso do campo inclinado na banda de condução, e no tratamento da banda de valência, baseado no modelo de Luttinger. O Hamiltoniano de Luttinger é expandido e diagonalizado, para as configurações de campo magnético paralelo e inclinado em relação a $\hat{\mathbf{z}}$. Os ramos de energia em função do campo magnético são calculados na banda de valência para $\theta = 0^\circ$, $\theta = 35^\circ$ e para $\theta = 70^\circ$. Nesta mesma banda foram selecionados os dois estados mais energéticos, cujos caracteres de spin indicam que ambos são predominantemente do tipo buraco pesado com spin para cima ou para baixo. A partir destes níveis, o desdobramento de spin do par elétron-buraco ΔE_Z é calculado para poços quânticos de diversas espessuras e para os ângulos de inclinação do campo magnético em relação a $\hat{\mathbf{z}}$ de 0° , 35° e 70° . A conexão com a abordagem experimental é realizada por meio de dados de desdobramento Zeeman determinados para um amostra de poço quântico múltiplo constituído de arseneto de gálio-alumínio, sobre a qual foi aplicado campo magnético em $\theta = 0^\circ$ e $\theta = 70^\circ$. As curvas ΔE_Z calculadas neste trabalho mostram uma concordância razoável com os dados experimentais, tanto no caso $\theta = 0^\circ$ quanto no caso $\theta = 70^\circ$.

ABSTRACT

This work is aimed to theoretically determine, based on the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method, the energy spectrum of the minimum of conduction band and the top of valence band, in a quantum well heterostructure based on gallium arsenide, in the presence of a tilted magnetic field. In this work, conduction and valence bands are independently treated. For the conduction band, it is employed the effective-mass Hamiltonian when the magnetic field is parallel, perpendicular, and tilted in relation to the confinement direction of the quantum well, defined here as $\hat{\mathbf{z}}$. The basis that solves the orbital problem for $\theta = 0^\circ$ is also employed to perpendicular ($\theta = 90^\circ$) and tilted magnetic field cases through two approaches: (i) expansion and diagonalization of orbital part of Hamiltonian and (ii) non-degenerate perturbation theory. The problem for $\theta = 90^\circ$ is also analytically treated, through a basis composed of confluent hypergeometric functions. Results obtained by approach (i) are shown to be equivalent to those extracted from the analytical treatment, for a broad range of magnetic field intensity and quantum well thickness. Such a result motivates the employment of the basis, determined for $\theta = 0^\circ$, to deal with tilted field in the conduction band and with the treatment of valence band, based on the Luttinger model. The Luttinger Hamiltonian is expanded and diagonalized, in parallel and tilted magnetic field configurations, with respect to $\hat{\mathbf{z}}$. The energy branches as a function of the magnetic field intensity are computed for the valence band when $\theta = 0^\circ$, $\theta = 35^\circ$, and $\theta = 70^\circ$. The two topmost states are selected, whose spin characters indicate that both predominantly have a heavy hole type with either spin-up or spin-down. From these levels, it is calculated the electron-hole pair spin splitting ΔE_Z , for quantum wells of different thickness and for angles 0° , 35° and 70° with respect to $\hat{\mathbf{z}}$. The connection with experimental results is performed by using the data of the Zeeman splitting obtained from a sample of multiple quantum wells made of gallium-aluminium arsenide, on which a magnetic field is applied in $\theta = 0^\circ$ and in $\theta = 70^\circ$. The calculated ΔE_Z show a reasonable agreement with the experimental data in both cases when $\theta = 0^\circ$ and $\theta = 70^\circ$.

Sumário

Sumário	v
1 Introdução	1
2 Estrutura de bandas em semicondutores e o método $k \cdot p$	8
3 Cálculo da banda de condução	16
3.1 Caso $\theta = 0^\circ$	16
3.2 Caso $\theta = 90^\circ$	22
3.2.1 Diagonalização na base $\{ \nu\rangle\}$	24
3.2.2 Teoria de perturbação	28
3.2.3 Solução analítica	30
3.2.4 Análise dos resultados	34
3.3 Campo inclinado	36
3.3.1 Diagonalização na base $\{ \nu\rangle\}$	38
3.3.2 Teoria de perturbação	46
4 Cálculo da banda de valência	59
4.1 Caso $\theta = 0^\circ$	65
4.2 Campo inclinado	79
5 Considerações finais	97

1. Introdução

Apesar do pequeno número de trabalhos encontrados na literatura científica, o interesse no tema campo magnético inclinado já vem de meados do século XX, visto que, nesta configuração, são previstos efeitos tais como quebra de simetria espacial e superposição de estados com números quânticos bem definidos, como o spin. Em 1968, Fang e Stiles [1] apresentaram um estudo dos efeitos de um campo magnético inclinado sobre as propriedades de um gás de elétrons bidimensional em interfaces de silício. No final da década de 1980, foi analisada a influência da orientação do campo magnético sobre medidas de magnetoresistência em heteroestruturas semicondutoras de poço quântico [2, 3]. Mais recentemente, campos magnéticos inclinados foram considerados em estudos numéricos de polarização de spin de elétrons e buracos confinados em pontos quânticos auto-organizados [4]. Além disso, Pochung et al. [5] observou os efeitos de campo inclinado sobre a rotação de spin eletrônico em pontos quânticos, os quais, devido ao extremamente longo tempo de decoerência [6], têm sido propostos como qubits para a implementação de computação quântica [7].

O presente trabalho consiste em um estudo teórico e sistemático dos efeitos de um campo magnético externo \mathbf{B} sobre o espectro de energia de uma heteroestrutura semicondutora do tipo poço quântico. Além das configurações usuais, onde o campo magnético é aplicado paralelamente ou perpendicularmente à direção de crescimento da heteroestrutura [8], foi considerada uma configuração intermediária, onde o campo magnético forma um ângulo de inclinação θ em relação à direção de crescimento da amostra (tal que $0^\circ < \theta < 90^\circ$). Antes de entrar em detalhes sobre o cálculo da estrutura de bandas, tema dos próximos capítulos, conceitos básicos sobre o crescimento e o estudo experimental de heteroestruturas semicondutoras serão abordados. Por fim, serão apresentados alguns resultados experimentais que servirão como uma das motivações para a realização deste trabalho.

Pode-se afirmar que boa parte dos avanços tecnológicos da segunda metade do último século não seriam possíveis sem a utilização de materiais semicondutores nanoestruturados. As chamadas heteroestruturas semicondutoras, as quais são junções, a nível atômico, de materiais diferentes, estão presentes na concepção dos diodos, no transistor, inventado em 1947 e que possibilitou a criação dos circuitos integrados e dos microprocessadores [9], nos diodos emissores de luz (LED's), nos lasers de Terahertz [10], entre outros. O interesse

em aplicações práticas foi talvez o maior responsável pela grande quantidade de estudos na área de heteroestruturas semicondutoras, mas deve-se destacar também a sua importância em física básica, principalmente no estudo quântico da matéria em estado sólido [11, 12].

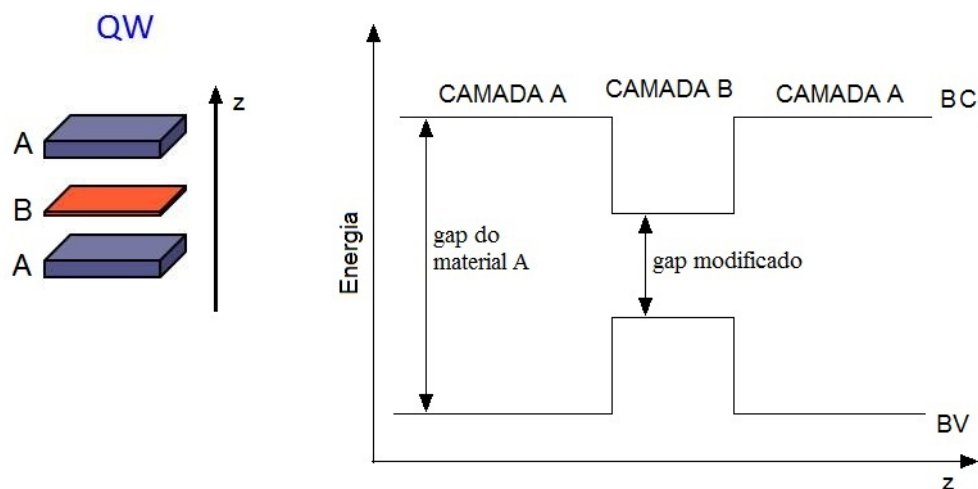


FIGURA 1.1: A esquerda, representação de uma amostra semicondutora, sendo destacadas as camadas de materiais A e B, depositadas em sequência seguindo a direção de crescimento \hat{z} . A direita, diagrama das bandas de energia em torno do material B, em relação à direção de crescimento. Observa-se que na camada B o *gap* de energia é menor que na camada A, o que modifica o perfil de potencial e forma um poço quântico em cada banda.

A aplicação tecnológica de heteroestruturas semicondutoras exige uma alta precisão na construção de tais amostras. Entre as técnicas de crescimento vale destacar a Epitaxia de Feixe Molecular (MBE, do inglês *Molecular Beam Epitaxy*) [13], a qual consiste de um feixe colimado de átomos que incide sobre um substrato presente em uma câmara de vácuo e com controle de temperatura. Com esta técnica, o material é construído átomo a átomo, uma monocamada por vez. Modificações na composição de camadas na amostra implica em modificações na estrutura de bandas do material em crescimento, inclusive para o *gap*¹ de energia entre as bandas de condução (BC) e de valência (BV). Esta mudança no valor do *gap*, que pode ocorrer em uma, duas ou três direções implica na formação de potenciais de confinamento quântico nestas direções, levando ao surgimento de estados quantizados no interior das heteroestruturas formadas. No caso de confinamento apenas na direção de crescimento (confinamento unidimensional) temos a formação de uma heteroestrutura de poço quântico, cuja largura é tipicamente da ordem de 10 nanômetros, ou 40 monocamadas

¹*gap*, termo em inglês que significa lacuna, literalmente uma lacuna entre as bandas de energia permitida em um sólido cristalino.

atômicas [14]. A Figura 1.1 apresenta um esquema de uma heteroestrutura de poço quântico. O confinamento em duas dimensões leva a formação de heteroestruturas do tipo fio quântico [15], e em três dimensões há a formação de um ponto quântico, que em muitos aspectos pode ser tratado como um "átomo artificial" [16, 17, 18].

A construção de estruturas atômicas em escala nanométrica e a possibilidade de estudo experimental de partículas quânticas confinadas faz das heteroestruturas semicondutoras verdadeiros laboratórios de mecânica quântica [19]. O estudo experimental das propriedades de uma amostra semicondutora é realizado por diversas técnicas [20, 21, 22], entre elas a espectroscopia de Fotoluminescência (PL) [23]. Esta técnica é baseada na excitação de uma amostra semicondutora através da luz de um laser com comprimento de onda na região visível e infravermelha do espectro. Os fótons incidentes sobre a amostra são absorvidos por elétrons que populam estados na banda de valência, fazendo-os ocupar estados na banda de condução. As vacâncias ou estados não-ocupados na banda de valência podem ser tratados como ocupados por partículas de carga positiva $+e$, conhecidas como buracos. Frequentemente, há a formação de um estado ligado entre um elétron na banda de condução e um buraco na banda de valência, através de atração coulombiana. O par ligado de um elétron e um buraco é conhecido como exciton neutro (X^0) [24]. Podem haver casos de ligações entre um elétron e dois buracos, ou dois elétrons e um buraco, onde são formados excitons positivos (X^+) ou negativamente carregados (X^-) [25], respectivamente. Quando há a recombinação de um par elétron-buraco, ocorre a emissão de um fóton que passa por um dispositivo fotodetector [23]. A partir da contagem e do comprimento de onda dos fótons detectados várias informações podem ser obtidas sobre a estrutura de energia de um material semicondutor homogêneo ou de uma heteroestrutura semicondutora.

Pode-se aplicar campos externos, como campo elétrico ou magnético, durante medidas de PL de uma heteroestrutura, justamente para observar os efeitos destes campos sobre os níveis de energia da amostra. Por exemplo, a aplicação de um campo magnético \mathbf{B} apontado sobre a direção de crescimento de uma heteroestrutura de poço quântico leva ao levantamento da degenerescência dos níveis de Landau em cada sub-banda de energia dentro da heteroestrutura. A técnica de espectroscopia de fotoluminescência realizada na presença de um campo magnético externo é conhecida como Magnetoluminescência (MPL) [26].

Usualmente as medidas de MPL são realizadas quando a direção de crescimento da

amostra é posicionada paralelamente ou perpendicularmente à direção do campo magnético [8]. Ambos os casos possuem descrição teórica bem estabelecida [27]. Para o caso da banda de condução de uma heteroestrutura de poço quântico formada por materiais com estrutura cristalina do tipo blenda de zinco, tais como o arseneto de gálio (GaAs), os níveis de energia no interior do poço quântico na banda de condução podem ser obtidos de maneira analítica, utilizando a aproximação do Hamiltoniano de massa efetiva [12, 28], como será descrito nos próximos capítulos. No entanto, por dificuldades técnicas ligadas ao posicionamento da amostra e à incidência da luz do laser, apenas nos últimos anos pôde-se realizar experimentos de MPL com campo magnético inclinado em um ângulo θ maior que 0° e menor que 90° em relação à direção de crescimento da amostra [29]. Um desses experimentos foi realizado por Fernandes dos Santos et al. [30] utilizando uma amostra de poço quântico múltiplo (MQW, do inglês *multiple quantum well*) [31], cujo perfil de potencial é mostrado na Figura 1.2.

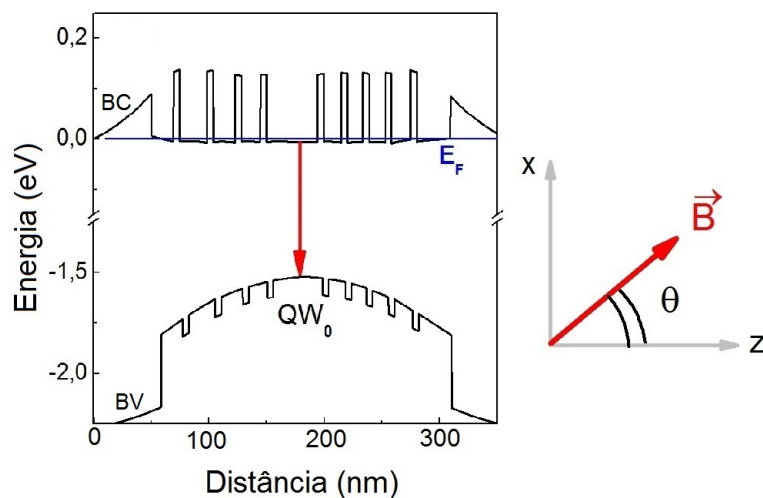


FIGURA 1.2: Perfil da energia potencial para as bandas de valência e de condução da heteroestrutura de MQW. É representada a transição eletrônica no poço central QW_0 . Ao lado, representação do campo magnético inclinado em relação à direção de crescimento \hat{z} da amostra.

O poço quântico foi crescido por MBE e consiste de camadas alternadas de $(Al_xGa_{1-x}As)_\alpha$ $(Al_yGa_{1-y}As)_\beta$, onde $\alpha \approx 65$ monocamadas e $\beta = 15$ monocamadas são respectivamente a largura dos poços e das barreiras que os separam. A banda de valência possui um perfil parabólico, o que propicia recombinações de elétrons e buracos com emissão de fótons de diferentes comprimentos de onda para os diferentes poços que compõem o MQW.

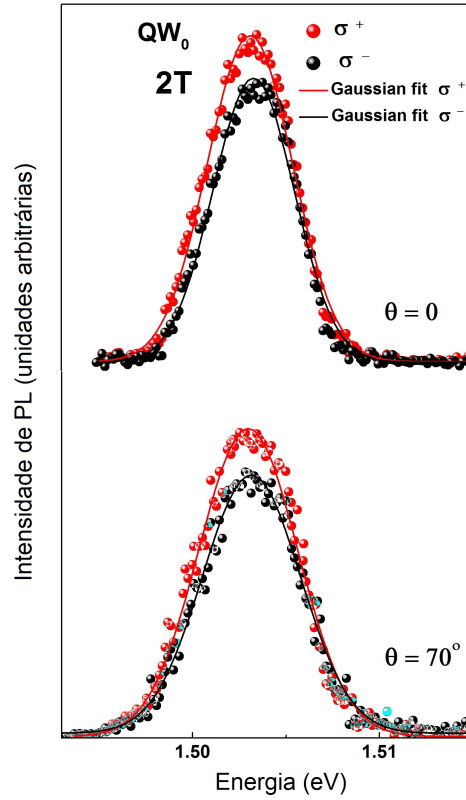


FIGURA 1.3: Componentes σ^+ e σ^- de emissão de Fotoluminescência medidas em um campo de 2 teslas, para \mathbf{B} paralelo à direção de crescimento e inclinado em 70° .

Foram realizadas medidas de Fotoluminescência circularmente polarizada, a uma temperatura de 300 mK e campo magnético de até 18 T. O procedimento foi realizado em duas diferentes configurações: com o campo magnético apontando paralelamente à direção $\hat{\mathbf{z}}$ ($\theta = 0^\circ$) e inclinado em 70° . A Figura 1.3 apresenta as componentes σ^+ e σ^- da PL circularmente polarizada, medidas em um campo de intensidade $B = 2$ T, para o poço central QW_0 indicado na Figura 1.2. A componente de PL circularmente polarizada a direita, σ^+ , está associada à transição entre o estado de buraco pesado (HH) com número quântico $m_J = -3/2$, da banda de valência, e o estado de spin para baixo do elétron ($m_S = -1/2$), da banda de condução. Já a componente circularmente polarizada a esquerda, σ^- , se associa à transição entre o estado HH de $m_J = +3/2$ e o estado eletrônico de spin para cima.

A partir dos valores de energia E_{σ^+} e E_{σ^-} dos picos σ^+ e σ^- das medidas de PL pôde-se determinar experimentalmente, para cada intensidade e inclinação do campo magnético, o desdobramento de spin do par elétron-buraco ΔE_Z , também chamado de desdobramento Zeeman e dado por $\Delta E_Z = E_{\sigma^-} - E_{\sigma^+}$. Os valores de desdobramento Zeeman obtidos

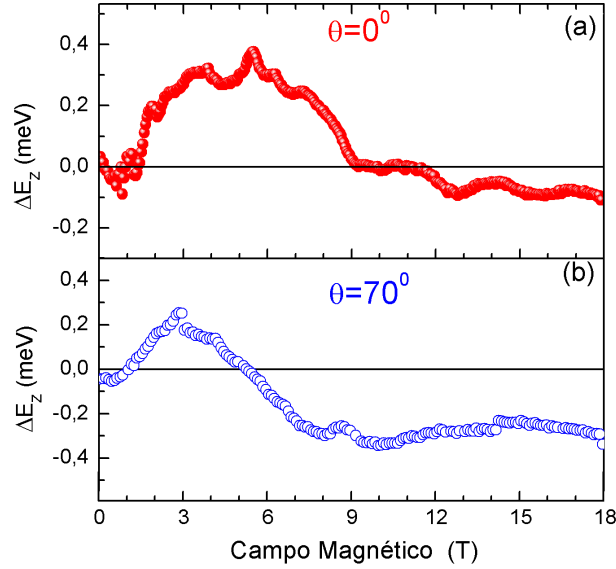


FIGURA 1.4: Valores experimentais de desdobramento Zeeman obtidos para os ângulos de 0° (a) e 70° (b).

experimentalmente são apresentados em função da intensidade B do campo magnético, para $\theta = 0^\circ$ e $\theta = 70^\circ$ na Figura 1.4.

A medida de desdobramento Zeeman obtida experimentalmente para $\theta = 70^\circ$ serviu como uma das motivações para a realização deste trabalho, além do tema de campo magnético inclinado possuir o interesse do ponto de vista de física básica e ser pouco explorado experimental e teoricamente. Nos próximos capítulos, os cálculos dos níveis de energia das banda de condução e de valência em uma heteroestrutura de poço quântico serão apresentados. A partir destes resultados, pode-se calcular o desdobramento Zeeman de maneira teórica e comparar com as medidas experimentais. O Capítulo 2 descreve de maneira breve o método utilizado neste trabalho para o cálculo da estrutura de bandas, o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [28]. No Capítulo 3 é apresentado o cálculo das sub-bandas em um poço quântico na banda de condução, na presença de um campo magnético \mathbf{B} , inicialmente para as configurações paralela ($\theta = 0^\circ$), e perpendicular à direção de crescimento ($\theta = 90^\circ$), cujo tratamento matemático é realizado de três diferentes maneiras. Em seguida, o cálculo dos níveis de energia na presença de um campo magnético inclinado é realizado através de dois métodos diferentes, e os resultados são comparados entre si. Neste caso, são consideradas diferentes inclinações θ entre o campo magnético e a direção de crescimento do poço quântico, tomada como sendo $\hat{\mathbf{z}}$. Já no Capítulo 4 considera-se os efeitos do campo magnético inclinado sobre

a banda de valência de uma heteroestrutura de poço quântico. Utilizando-se de uma aproximação do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, o método de Luttinger [15, 32], os níveis de energia no interior do poço são calculados para \mathbf{B} paralelo e inclinado em relação a $\hat{\mathbf{z}}$, e o desdobramento Zeeman é determinado para ambos os casos. As considerações finais são apresentadas no Capítulo 5.

2. Estrutura de bandas em semicondutores e o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

No vácuo, o movimento de um elétron é espacialmente descrito por uma função de onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, onde \mathbf{r} é a sua posição em relação a um dado referencial e \mathbf{k} é o seu vetor de onda, sendo $|\mathbf{k}| = k = 2\pi/\lambda$, onde λ é o comprimento de onda de de Broglie do elétron. Sua energia é dada simplesmente por uma relação de dispersão parabólica:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (2.1)$$

onde m_0 é a massa do elétron livre. No entanto, quando considera-se o movimento de um elétron em um sólido cristalino, alguns fatores devem ser levados em conta, como a atuação do potencial conjunto dos íons que formam a rede cristalina e dos ditos "elétrons de caroço", localizados nas camadas mais internas dos átomos. Todos estes efeitos podem ser descritos através de um potencial V_0 que tenha a periodicidade da rede cristalina [33],

$$V_0(\mathbf{r}) = V_0(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n), \quad (2.2)$$

onde \mathbf{R}_n é um vetor da rede de Bravais.

A energia de um elétron em movimento dentro de um cristal é obtida pela solução da equação de Schrödinger

$$H \psi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = E_\nu \psi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Para manter a densidade de probabilidade $|\psi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{r})|^2$ constante, a função de onda $\psi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{r})$, ao realizar uma translação igual a um vetor \mathbf{R}_n da rede cristalina, deve ser a mesma a menos de um fator de fase $e^{i\phi}$. A partir desta e de outras condições, Felix Bloch [34] elaborou o teorema que leva seu nome:

$$\psi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) \psi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (2.4)$$

As funções de onda que satisfazem o teorema de Bloch são dadas por

$$\psi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

onde as funções $u_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r})$, chamadas de funções de Bloch, possuem a periodicidade da rede, isto é, $u_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv u_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$.

A partir de métodos aproximativos como o modelo de Tight-Binding [35], pode-se mostrar que os níveis de energia discretos dos átomos se desdobram em bandas de energia, quando estes são aproximados formando sólidos cristalinos. As energias permitidas dos elétrons, que formam um contínuo quando os mesmos estão livres, passam a apresentar bandas de energia permitida separadas por bandas de energia proibida (os chamados *gaps*) quando os elétrons se encontram sob influência do potencial periódico V_0 .

As bandas de energia E_ν em um cristal vão sendo ocupadas por todos os seus elétrons, seguindo o Princípio de Exclusão de Pauli [35]. A banda totalmente ocupada de maior energia é denominada de banda de valência (BV). A banda seguinte é chamada de banda de condução (BC). Em metais, a BC é parcialmente ocupada, fornecendo ao cristal elétrons aptos a se mover na presença de um campo elétrico externo. Já em isolantes, não há elétrons ocupando a banda de condução, e o *gap* de energia entre a BV e a BC é muito grande. No caso de semicondutores, o *gap* entre a BC e a BV é pequeno, da ordem de alguns eV, e mesmo a energia térmica $k_B T$ já é capaz de excitar elétrons da banda de valência a ocuparem estados na banda de condução [33].

Para uma amostra semicondutora homogênea, denominada de material *bulk*, o modelo mais simplificado para a estrutura de bandas em torno do *gap* é dado por uma dispersão parabólica e isotrópica para as bandas de condução, $E_c(\mathbf{k})$, e de valência, $E_v(\mathbf{k})$,

$$E_{c/v}(\mathbf{k}) = \pm \left(\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{c/v}^*} \right), \quad (2.6)$$

onde E_g é o valor do *gap* de energia, dado por $E_g = E_c(\mathbf{0}) - E_v(\mathbf{0})$. A relação de dispersão (2.6) é muito semelhante à relação de dispersão de elétron livre (2.1), onde a massa do elétron livre m_0 é trocada por uma massa efetiva m_c^* (m_v^*) associada à banda de condução (de valência) do semicondutor. Este modelo simplificado não é capaz de explicar detalhes da estrutura de bandas como anisotropia, não-parabolicidade e interação entre estados de

buraco pesado (HH) e buraco leve (LH). Assim, se faz necessário o emprego de um método mais realista para a determinação da estrutura de bandas em um semicondutor, o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [28, 36].

O método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ é aplicado a partir de um ponto de alta simetria \mathbf{k}_0 , onde assume-se como conhecida a estrutura de bandas $E_\nu(\mathbf{k}_0)$ [33]. No caso de semicondutores do tipo blenda de zinco, \mathbf{k}_0 é dado pelo ponto Γ da 1ª zona de Brillouin, isto é, $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}$. A obtenção do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ se dá pela aplicação do Hamiltoniano da rede

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \quad (2.7)$$

sobre a função de onda de Bloch $\psi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ dada por (2.5). Obtém-se a seguinte equação de Schrödinger:

$$H_0 \psi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = E_\nu(\mathbf{k}) \psi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{r}) ,$$

ou

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \right] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_\nu(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad (2.8)$$

onde $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ é o operador momento linear. Pela atuação do operador \mathbf{p} sobre a parte de onda plana da função de onda de Bloch, considerando que $u_{\nu, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \nu, \mathbf{k} \rangle$, se obtém a seguinte relação:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right] |\nu, \mathbf{k}\rangle = E_\nu(\mathbf{k}) |\nu, \mathbf{k}\rangle . \quad (2.9)$$

Incluindo a interação spin-órbita [28],

$$H_{SO} = -\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times (\nabla V_0) , \quad (2.10)$$

a equação (2.9) torna-se

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times (\nabla V_0) \right] |\mu, \mathbf{k}\rangle = E_\mu(\mathbf{k}) |\mu, \mathbf{k}\rangle , \quad (2.11)$$

onde $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times (\nabla V_0)$, e $\boldsymbol{\sigma}$ é o vetor das matrizes de Pauli. Em (2.11) foi utilizado o índice de banda μ que inclui junto a ν o índice σ dos autoestados da matriz de Pauli σ_z . Para um dado ponto \mathbf{k}_0 tanto os conjuntos $\{|\nu, \mathbf{k}_0\rangle\}$ como $\{|\mu, \mathbf{k}_0\rangle\}$ formam bases completas

e ortonormais [37]. Assim, os estados $|\mu, \mathbf{k}\rangle$ são expandidos em termos das funções de Bloch $|\nu, \mathbf{0}\rangle$ e dos autoestados de spin $|\sigma\rangle$:

$$|\mu, \mathbf{k}\rangle = \sum_{\nu', \sigma'} A_{\nu', \sigma'}^{(\mu)}(\mathbf{k}) |\nu', \sigma'\rangle, \quad (2.12)$$

onde $|\nu', \sigma'\rangle = |\nu', \mathbf{0}\rangle \otimes |\sigma'\rangle$. Pode-se, então, reescrever (2.11) como

$$\begin{aligned} \sum_{\nu', \sigma'} \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times (\nabla V_0) \right] A_{\nu', \sigma'}^{(\mu)}(\mathbf{k}) |\nu', \sigma'\rangle \\ = E_\mu(\mathbf{k}) \sum_{\nu', \sigma'} A_{\nu', \sigma'}^{(\mu)}(\mathbf{k}) |\nu', \sigma'\rangle. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Multiplicando pela esquerda por $\langle \sigma, \nu |$, se obtém o chamado Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$:

$$\boxed{\begin{aligned} \sum_{\nu', \sigma'} \left\{ \left[E_{\nu'}(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu, \nu'} \delta_{\sigma, \sigma'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\nu, \nu'} + \Delta_{\nu, \nu'} \right\} A_{\nu', \sigma'}^{(\mu)}(\mathbf{k}) \\ = E_\mu(\mathbf{k}) A_{\nu', \sigma'}^{(\mu)}(\mathbf{k}), \end{aligned}} \quad (2.14)$$

onde

$$E_{\nu'}(\mathbf{0}) \delta_{\nu, \nu'} \delta_{\sigma, \sigma'} = \langle \sigma, \nu | \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0 \right) | \nu', \sigma' \rangle, \quad (2.15a)$$

$$\mathbf{P}_{\nu, \nu'} = \langle \sigma, \nu | \boldsymbol{\pi} | \nu', \sigma' \rangle, \quad (2.15b)$$

$$\Delta_{\nu, \nu'} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle \sigma, \nu | \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times (\nabla V_0) | \nu', \sigma' \rangle. \quad (2.15c)$$

O elemento de matriz da interação spin-órbita $\Delta_{\nu, \nu'}$ resulta no levantamento de degenerescências em $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Para o caso de semicondutores tais como o GaAs, em que a banda de valência é formada por estados tipo- p (momento angular orbital $\ell = 1$) [33], levando em consideração o spin há seis estados degenerados em $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. A interação spin-órbita divide estes estados em dois subespaços, um deles 4 vezes degenerado no ponto Γ , as bandas de buraco leve (LH) e buraco pesado (HH), com momento angular total $J = 3/2$. O outro subespaço, de momento angular total $J = 1/2$, corresponde aos estados *split-off* de spin órbita, separados em relação aos estados HH e LH , em $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, por um valor de energia Δ . Já na banda de condução, tipo- s , o elemento de matriz $\Delta_{c, c'}$ se anula [28]. Uma representação da estrutura de bandas do GaAs em torno do gap é mostrada na Figura 2.1.

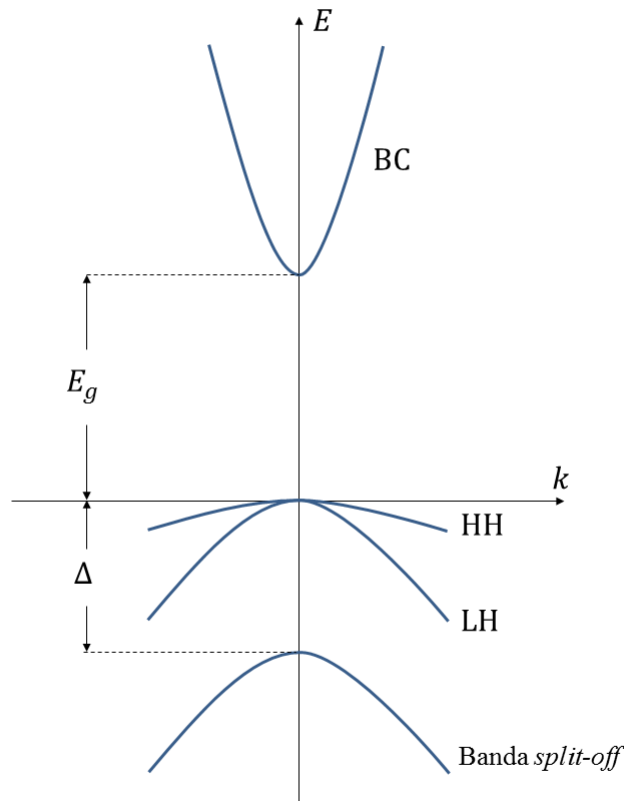


FIGURA 2.1: Representação da estrutura de banda do GaAs em torno do *gap* entre as bandas de condução e de valência. Observa-se que os estados de *HH* e *LH* da BV são degenerados no ponto $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ e estão separados por uma energia Δ em relação aos estados *split-off* de spin-órbita.

O Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ em (2.14) possui dimensão infinita, e sua diagonalização fornece uma relação de dispersão $E_\mu(\mathbf{k})$ e coeficientes de expansão $A_{\nu',\sigma'}^{(\mu)}(\mathbf{k})$ para todos os valores de \mathbf{k} e todos os índices de banda μ . No entanto, em aplicações práticas do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ o interesse se encontra em um grupo de N bandas adjacentes, para as quais deseja-se obter a relação de dispersão $E_\mu(\mathbf{k})$ em torno do ponto de expansão \mathbf{k}_0 [28]. Portanto, aplica-se o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de maneira completa apenas para este conjunto de N bandas, sendo que as contribuições de outras bandas são consideradas através de métodos perturbativos como a teoria de perturbação quasi-degenerada de Löwdin [38], baseada em teoria de perturbação e diagonalização exata de subespaços específicos.

A diagonalização de (2.14) através de teoria de perturbação de segunda ordem gera a seguinte relação de dispersão para a ν -ésima banda (sem levar em conta o spin):

$$E_\nu(\mathbf{k}) = E_\nu(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\nu^*}, \quad (2.16)$$

onde a massa efetiva m_ν^* é dada por

$$m_\nu^* = m_0 \left[1 + \frac{2}{m_0} \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{P_{\nu,\nu'}^2}{E_\nu(\mathbf{0}) - E_{\nu'}(\mathbf{0})} \right]^{-1}. \quad (2.17)$$

Para o caso anisotrópico, utiliza-se o tensor massa efetiva [15, 33]:

$$\frac{1}{m_\nu^{(ij)}} = \frac{1}{m_0} \left[\delta_{ij} + \frac{2}{m_0} \sum_{i,j} \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{P_{\nu,\nu'}^{(i)} P_{\nu,\nu'}^{(j)}}{E_\nu(\mathbf{0}) - E_{\nu'}(\mathbf{0})} \right]. \quad (2.18)$$

A contribuição dominante no somatório em (2.17) está no acoplamento $P_{\nu,\nu'}$ entre a banda ν e a próxima ν' . Assim, em torno do *gap* entre as bandas de condução e de valência, podemos reduzir a soma apenas a estas duas bandas:

$$m_c^* = m_0 \left[1 + \frac{2}{m_0} \frac{P_{c,v}^2}{E_c - E_v} \right]^{-1} = m_0 \left[1 + \frac{2}{m_0} \frac{P_{c,v}^2}{E_g} \right]^{-1}, \quad (2.19a)$$

$$m_v^* = m_0 \left[1 + \frac{2}{m_0} \frac{P_{c,v}^2}{E_v - E_c} \right]^{-1} = m_0 \left[1 - \frac{2}{m_0} \frac{P_{c,v}^2}{E_g} \right]^{-1}. \quad (2.19b)$$

Dependendo da magnitude do elemento de matriz $P_{c,v}^2$ a massa efetiva da banda de valência pode se tornar negativa e a massa efetiva da banda de condução pode ser muito menor que a massa do elétron livre m_0 [33]. Para as massas efetivas em (2.6), é uma boa aproximação usar

$$\frac{m_0}{m_{c/v}^*} \approx \frac{2}{m_0} \frac{P_{c,v}^2}{E_g}. \quad (2.20)$$

Na presença de campos elétricos e magnéticos constantes ou que variam lentamente sobre a escala de comprimento da constante de rede, os estados de elétrons e buracos podem ser descritos por meio do formalismo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ juntamente com a aproximação de função envelope, ou EFA (do inglês *Envelope Function Approximation*) [28]. Os campos elétrico e magnético podem ser aplicados externamente, através de contatos e imãs, ou podem ser campos gerados

por variações na estrutura cristalina, que é o caso de heteroestruturas.

Para entender o que é a EFA, parte-se da equação de Schrödinger

$$\left[\frac{(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times (\nabla V_0) + V(\mathbf{r}) + \frac{g_0}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}), \quad (2.21)$$

onde \mathbf{A} é o potencial vetor, tal que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, $V_0(\mathbf{r})$ é o potencial periódico da rede, $V(\mathbf{r})$ é um potencial escalar adicional, g_0 é o fator g do elétron no vácuo, e μ_B é o magneton de Bohr. A função de onda $\Psi(\mathbf{r})$ é expandida em termos das funções de Bloch $u_{\nu',\mathbf{0}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \nu', \mathbf{0} \rangle$ e dos autoestados de spin $|\sigma'\rangle$:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu',\sigma'} C_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) u_{\nu',\mathbf{0}}(\mathbf{r}) |\sigma'\rangle. \quad (2.22)$$

As oscilações das funções de Bloch $u_{\nu',\mathbf{0}}(\mathbf{r})$ são moduladas pelos coeficientes $C_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r})$, como mostra a Figura 2.2. A modulação varia lentamente em relação à escala de comprimento da constante de rede, e por isso os coeficientes $C_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r})$ são chamados de funções envelope [28].

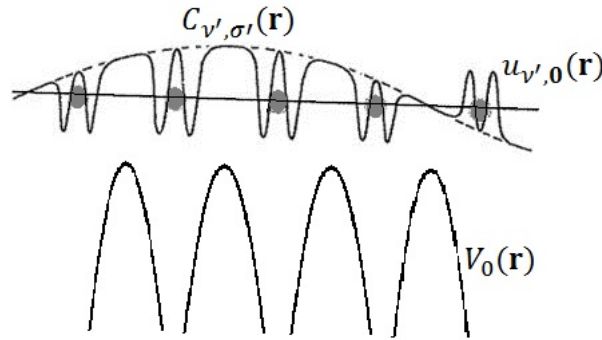


FIGURA 2.2: Representação espacial da função de onda $\Psi(\mathbf{r})$ de (2.22). Na parte de baixo da figura está representado o potencial periódico microscópico da rede cristalina $V_0(\mathbf{r})$. Os íons estão representados pelos círculos em cinza. Observa-se que a função de Bloch $u_{\nu',\mathbf{0}}(\mathbf{r})$ tem suas oscilações acentuadas nas regiões de baixo potencial em torno dos íons. Já a função envelope $C_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r})$ tem sua oscilação estendida em relação à rede, e atua modulando a amplitude de oscilação de $u_{\nu',\mathbf{0}}(\mathbf{r})$.

Utilizando a função de onda $\Psi(\mathbf{r})$ de (2.22) em (2.21), multiplicando pela esquerda

por $\langle \sigma | u_{\nu,0}^*(\mathbf{r}) \rangle$ e integrando em uma célula unitária, se obtém o chamado Hamiltoniano de multibanda, ou Hamiltoniano EFA:

$$\sum_{\nu',\sigma'} \left\{ \left[E_{\nu'}(\mathbf{0}) + \frac{(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] \delta_{\nu,\nu'} \delta_{\sigma,\sigma'} + \frac{1}{m_0} (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}) \cdot \mathbf{P}_{\nu,\nu'}_{\sigma,\sigma'} \right. \\ \left. + \Delta_{\nu,\nu'}_{\sigma,\sigma'} + \frac{g_0}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \delta_{\nu,\nu'} \right\} C_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) = E C_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}), \quad (2.23)$$

onde $V(\mathbf{r})$, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ e $C_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r})$ foram tomados como sendo constantes dentro de uma célula unitária e tirados para fora da integral. Nota-se grande similaridade entre o Hamiltoniano EFA em (2.23) e o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ em (2.14); no entanto, o vetor de onda \mathbf{k} do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ torna-se um operador no Hamiltoniano de multibanda (2.23), dado por:

$$\hat{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} = -i\nabla + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}. \quad (2.24)$$

Para o caso de uma banda parabólica, isotrópica e não-degenerada, como descrita pela relação de dispersão em (2.16), a aplicação de teoria de perturbação de segunda ordem de Löwdin [38] sobre o Hamiltoniano EFA em (2.23) gera o chamado Hamiltoniano de massa efetiva:

$$H = \frac{|-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}|^2}{2m_\nu^*} + V(\mathbf{r}) + \frac{g_\nu^*}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (2.25)$$

onde os elétrons na ν -ésima banda são tratados como partículas livres de massa efetiva m_ν^* e fator g efetivo g_ν^* movendo-se em um potencial externo $V(\mathbf{r})$ [12, 28]. O Hamiltoniano de massa efetiva será utilizado, no próximo capítulo, para o cálculo da banda de condução de uma heteroestrutura de poço quântico na presença de um campo magnético \mathbf{B} . Considera-se que a heteroestrutura em questão é constituída de arseneto de gálio que, como já foi dito neste texto, tem sua banda de condução formada de estados tipo- s , não-degenerados. Já para o cálculo da banda de valência, no Capítulo 4, será utilizado o método desenvolvido por Luttinger [32], baseado na aplicação de teoria de perturbação quasi-degenerada de Löwdin sobre o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ em (2.14) [15]. As bandas de condução e de valência dentro da heteroestrutura de poço quântico serão calculadas separadamente, sem levar em conta interações entre estados de uma e de outra banda.

3. Cálculo da banda de condução

Este capítulo trata da banda de condução de uma heteroestrutura semicondutora de poço quântico na presença de um campo magnético \mathbf{B} . O arseneto de gálio será considerado como o material semicondutor do qual a heteroestrutura é formada. Para a banda de condução será usada a aproximação parabólica dada pela equação (2.16), e será empregado o Hamiltoniano de massa efetiva (2.25) no cálculo do espectro de energia dentro do poço quântico:

$$H = \frac{|\mathbf{p} + e\mathbf{A}|^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) + \frac{g^*}{2}\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} , \quad (3.1)$$

onde m^* é a massa efetiva do elétron na banda de condução do GaAs, e $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ é o operador momento. No caso de uma heteroestrutura de poço quântico, cuja direção de crescimento é definida como sendo a direção $\hat{\mathbf{z}}$, o potencial adicional $V(\mathbf{r})$ é dado pelo potencial de confinamento $V(z)$, que é assumido como um poço infinito de largura L :

$$V(z) = \begin{cases} 0 , & |z| < L/2 \\ \infty , & |z| \geq L/2 \end{cases} . \quad (3.2)$$

Apesar do confinamento em z em uma heteroestrutura real não ser realmente infinito, a utilização deste potencial se mostra vantajosa por ter solução analítica, além do que o interesse, de fato, se encontra nos níveis de menor energia dentro do poço, para os quais o confinamento infinito é uma boa aproximação.

Neste capítulo, o campo magnético \mathbf{B} será considerado em três diferentes configurações: primeiramente o caso $\theta = 0^\circ$, onde o campo é apontado em paralelo à direção de crescimento da heteroestrutura; em seguida, o caso perpendicular $\theta = 90^\circ$, onde o vetor campo magnético forma um ângulo reto com a direção $\hat{\mathbf{z}}$; e por fim será tratado o caso não-usual de um campo magnético inclinado em um ângulo $0^\circ < \theta < 90^\circ$ em relação a $\hat{\mathbf{z}}$.

3.1 Caso $\theta = 0^\circ$

Considera-se aqui uma heteroestrutura de poço quântico na presença de um campo magnético \mathbf{B} constante aplicado na direção de crescimento da amostra. Uma representação do sistema é apresentada na Figura 3.1.

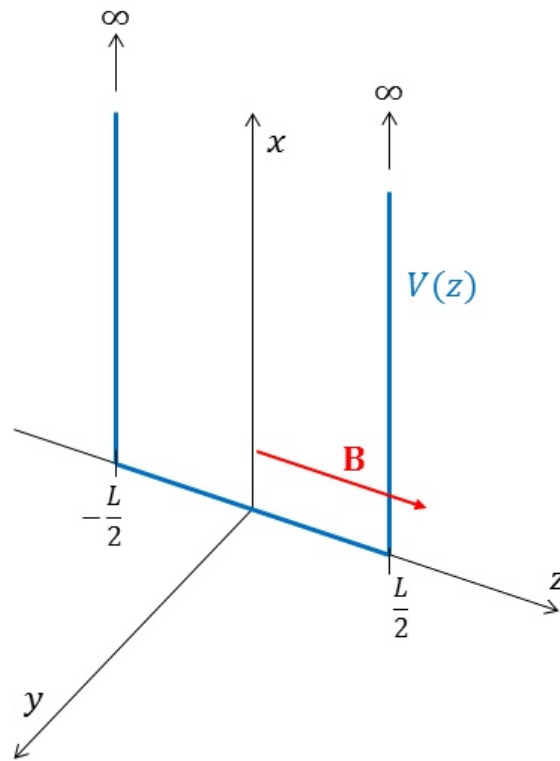


FIGURA 3.1: Representação da heteroestrutura de poço quântico, cujo confinamento é dado pelo potencial infinito $V(z)$. O campo magnético \mathbf{B} é apontado sobre a direção de crescimento $\hat{\mathbf{z}}$.

Parte-se do Hamiltoniano de massa efetiva

$$H = \frac{|\mathbf{p} + e\mathbf{A}|^2}{2m^*} + V(z) + \frac{g^*}{2}\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (3.3)$$

onde, para um campo $\mathbf{B} = B \hat{\mathbf{z}}$, o potencial vetor pode ser dado pelo seguinte calibre:

$$\mathbf{A} = xB \hat{\mathbf{y}}. \quad (3.4)$$

Substituindo (3.4) em (3.3), se obtém

$$H = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{e^2 B^2}{2m^*} x^2 + \frac{eB}{m^*} p_y x + \frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) + \frac{g^*}{2} \mu_B \sigma_z B. \quad (3.5)$$

Para determinar o espectro de energia dentro da heteroestrutura de poço quântico deve-se resolver a seguinte equação de autovalores e autovetores:

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle . \quad (3.6)$$

A partir do Hamiltoniano apresentado na equação (3.5), observa-se que as variáveis orbitais e de spin são separáveis. Assim, os autovetores de H podem escritos como

$$|\Psi\rangle = |\nu\rangle \otimes |\sigma\rangle , \quad (3.7)$$

onde $|\nu\rangle$ são os autoestados da parte orbital de H , e $|\sigma\rangle$ são os autovetores da matriz de Pauli σ_z .

Se por um lado, o potencial infinito $V(z)$ é responsável pelo confinamento na direção $\hat{\mathbf{z}}$, por outro lado, um campo magnético \mathbf{B} paralelo a $\hat{\mathbf{z}}$ dá origem a um confinamento no plano xy . Pela escolha de calibre em (3.4) o confinamento planar pode ser reduzido apenas à direção $\hat{\mathbf{x}}$, mantendo livre o movimento em $\hat{\mathbf{y}}$. Deste modo, a parte orbital $\psi_\nu(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \nu \rangle$ da função de onda pode ser dada pelo seguinte *ansatz*:

$$\psi_\nu(\mathbf{r}) = \exp(ik_y y) \phi_\mu(x, z) , \quad (3.8)$$

onde ν está associado aos números quânticos μ e k_y , sendo o último a componente y do vetor de onda \mathbf{k} do elétron e autovalor do seguinte operador:

$$\hat{k}_y = \frac{p_y}{\hbar} = -i \frac{\partial}{\partial y} . \quad (3.9)$$

Utilizando a definição em (3.9), pode-se reescrever o Hamiltoniano de (3.5) como

$$H = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 \hat{k}_y^2}{2m^*} + \frac{e^2 B^2}{2m^*} x^2 + \frac{eB}{m^*} \hbar \hat{k}_y x + \frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) + \frac{g^*}{2} \mu_B \sigma_z B ,$$

ou

$$H = H_z + H_x + H_s , \quad (3.10a)$$

sendo

$$H_z = \frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) ; \quad (3.10b)$$

$$H_x = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega_c^2(x - x_0)^2 ; \quad (3.10c)$$

$$H_s = \frac{1}{2}g^*\mu_B\sigma_z B ; \quad (3.10d)$$

onde $x_0 = -\frac{\hbar\hat{k}_y}{eB}$, e $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ é a frequência ciclotrônica de um elétron de carga absoluta e e massa efetiva m^* , movendo-se em um plano perpendicular a um campo magnético de intensidade B .

Observa-se, a partir dos termos orbitais de H dados por (3.10b) e (3.10c), que a solução espacial $\phi_\mu(x, z)$ pode ser escrita como o produto de uma função apenas de x e uma função apenas de z :

$$\phi_\mu(x, z) = \varphi_n(x) \phi_{n_z}(z) , \quad (3.11)$$

onde $\phi_{n_z}(z)$ são as auto-funções de um poço quântico infinito unidimensional em z :

$$\phi_{n_z}(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_z\pi}{L}z + \frac{n_z\pi}{2}\right) . \quad (3.12)$$

Na equação (3.12) $n_z = 1, 2, \dots$ é o número quântico associado aos níveis de energia dentro do poço. Obviamente o termo H_z , dado por (3.10b), atua sobre uma auto-função $\phi_{n_z}(z)$, segundo a equação de autovalores e auto-funções a seguir:

$$H_z \phi_{n_z}(z) = \varepsilon_{n_z} \phi_{n_z}(z) , \quad (3.13)$$

onde a auto-energia ε_{n_z} é dada pela energia do n_z -ésimo nível dentro de um poço quântico infinito de largura L :

$$\varepsilon_{n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m^*L^2}n_z^2 . \quad (3.14)$$

Sobre a função $\varphi_n(x)$ de (3.11) atua o termo H_x do Hamiltoniano, dado por (3.10c). Nota-se que H_x tem a forma do Hamiltoniano de um oscilador harmônico unidimensional em x , cujo movimento oscilatório está centrado em $x_0 = -\frac{\hbar\hat{k}_y}{2m^*}$ e tem frequência $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$. Portanto, as funções $\varphi_n(x)$ são dadas pelas auto-funções de um oscilador harmônico

unidimensional:

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \ell_c \sqrt{\pi}} \exp \left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\ell_c^2} \right] \mathcal{H}_n \left(\frac{x-x_0}{\ell_c} \right), \quad (3.15)$$

onde $\ell_c = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ é o chamado comprimento magnético, associado ao tamanho da órbita ciclotrônica clássica de uma partícula de carga e em um campo magnético de intensidade B ; e $\mathcal{H}_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x^2}]$ é um polinômio de Hermite de ordem n [12].

Atuando H_x sobre as funções de onda $\varphi_n(x)$, e resolvendo a seguinte equação de autovalores e auto-funções:

$$H_x \varphi_n(x) = \varepsilon_n \varphi_n(x), \quad (3.16)$$

obtem-se para as auto-energias ε_n os igualmente espaçados níveis de Landau:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (3.17)$$

onde $n = 0, 1, 2, \dots$. Observa-se que, apesar das auto-funções $\varphi_n(x)$ dependerem de k_y (por meio de x_0), o mesmo não ocorre com as auto-energias ε_n . Portanto, k_y é um bom número quântico, pois descreve o movimento livre do elétron em y sem afetar as auto-energias, e pode ser igualado a zero.

Como foi dito, a parte de spin da solução $|\Psi\rangle$ do Hamiltoniano H é dada pelos autoestados $|\sigma\rangle$ de σ_z , $|+\rangle$ (spin para cima) e $|-\rangle$ (spin para baixo), cujos autovalores são $+1$ e -1 , respectivamente. Portanto, atuando H_s (equação (3.10d)) sobre $|\sigma\rangle$, obtém-se:

$$H_s |\pm\rangle = \pm \frac{1}{2} g^* \mu_B B |\pm\rangle. \quad (3.18)$$

Desta forma, através do spin eletrônico cada nível de energia $\varepsilon_\nu = \varepsilon_{n_z} + \varepsilon_n$ se abre em dois níveis, separados em energia por $\Delta\varepsilon_s = g^* \mu_B B$.

A Figura 3.2 apresenta os níveis de energia $\varepsilon_\nu \pm \frac{1}{2} g^* \mu_B B$ em função da intensidade B de um campo magnético apontado sobre a direção \hat{z} , para um poço quântico de largura $L = 18$ nanômetros. Foram calculados três níveis n_z do poço quântico infinito, os quais se abrem nos níveis de Landau $n = 0, 1, \dots, 10$ e nos autovalores de spin $\pm \frac{1}{2} g^* \mu_B B$. Variou-se a intensidade B do campo magnético de 0 a 20 T, e foram considerados parâmetros do

arseneto de gálio para a massa efetiva ($m^* = 0.067 m_0$) e para o fator g efetivo ($g^* = -0.45$) [28].

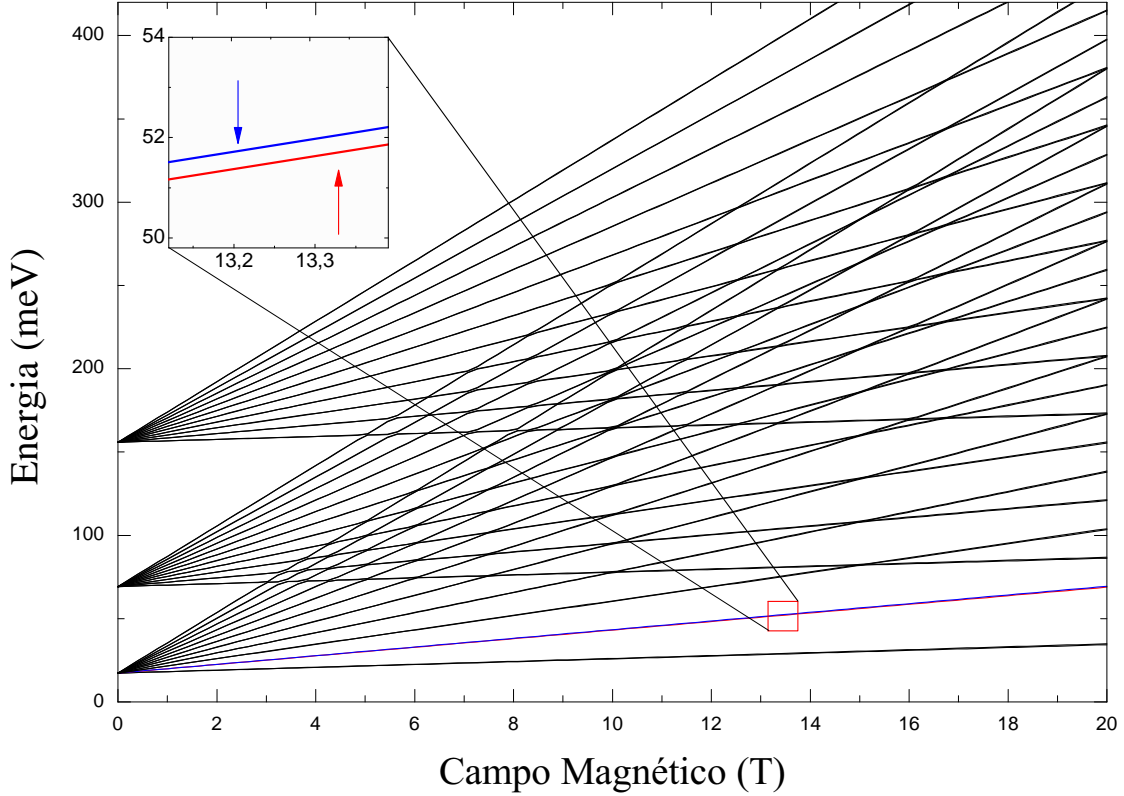


FIGURA 3.2: Ramos de energia em função da intensidade do campo magnético aplicado, para um sistema representado pela Figura 3.1. Observa-se que em $B = 0$ há apenas três níveis de energia, e com o aumento de B a degenerescência dos níveis de Landau e de spin é levantada. O desdobramento de spin $\Delta\varepsilon_s$ é muito pequeno se comparado à diferença entre dois níveis de Landau adjacentes. No detalhe é representado o desdobramento de spin do nível de energia dado pelo estado $|n_z, n\rangle = |1, 1\rangle$. Observa-se que o nível de spin para baixo é mais energético que o nível de spin para cima, devido ao sinal negativo do fator g efetivo do GaAs.

Observa-se que, para $B = 0$, os níveis de energia de cada sub-banda n_z estão todos degenerados nos valores ε_{n_z} , dados pela equação (3.14). Para $B \neq 0$ a degenerescência dos níveis de Landau e de spin é quebrada, e formam-se as três sub-bandas mostradas na Figura 3.2. Nota-se que os níveis de energia variam de maneira linear com o campo magnético, já que tanto os níveis de Landau ε_n (equação (3.17)) como as contribuições de spin $\pm \frac{1}{2}g^*\mu_B B$ dependem da primeira potência de B .

De maneira clara, é possível distinguir onze ramos de energia em cada sub-banda n_z mostrada na Figura 3.2. No entanto estes ramos, os quais representam estados $|\nu\rangle = |n_z, n\rangle$, também se dividem em dois devido ao levantamento da degenerescência de spin. Isto é mostrado no detalhe do canto superior esquerdo da Figura 3.2 onde, para o estado $|1, 1\rangle$, há um ramo de energia de spin para cima (representado por \uparrow) e um ramo de spin para baixo (representado por \downarrow). No entanto, como se pode notar, estes ramos estão muito próximos entre si. Por exemplo, para um campo de intensidade $B = 18$ T, a diferença de energia entre dois níveis de Landau adjacentes dentro de uma mesma subbanda é de aproximadamente 31.11 meV. Já a diferença de energia entre os ramos de spin para cima e spin para baixo, para $B = 18$ teslas, é $\Delta\varepsilon_s \approx 0.47$ meV.

3.2 Caso $\theta = 90^\circ$

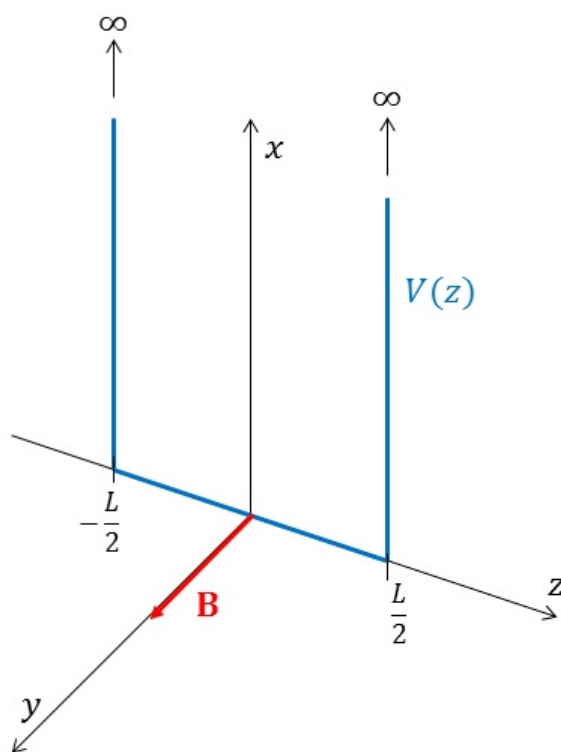


FIGURA 3.3: Representação da heteroestrutura de poço quântico, cujo confinamento é dado pelo potencial infinito $V(z)$. O campo magnético \mathbf{B} forma um ângulo de 90° com a direção de crescimento \hat{z} .

Nesta seção, a estrutura eletrônica da banda de condução será investigada no caso em que um campo magnético é aplicado perpendicularmente à direção de crescimento do poço quântico, como mostra a Figura 3.3. No caso em que o campo \mathbf{B} aponta na direção de crescimento da heteroestrutura, tratado na seção anterior, o elétron está sujeito ao confinamento exercido pelo potencial $V(z)$ e a um confinamento no plano xy , o qual gera uma quantização de energia neste plano: os níveis de Landau. No entanto, quando o campo magnético aponta em uma direção perpendicular à direção $\hat{\mathbf{z}}$, os efeitos do campo, antes ocorrentes no plano xy , passam para z , e não há a quebra da degenerescência dos níveis de Landau.

Para o campo magnético atuante no sistema, que neste problema é dado por $\mathbf{B} = B \hat{\mathbf{y}}$, o Hamiltoniano H , obtido a partir do Hamiltoniano de massa efetiva (equação (3.1)), é dado por

$$H = \frac{|\mathbf{p} + e\mathbf{A}|^2}{2m^*} + V(z) + \frac{g^*}{2} \mu_B \sigma_y B, \quad (3.19)$$

onde σ_y é a seguinte matriz de Pauli:

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Apesar do spin ser quantizado na direção $\hat{\mathbf{z}}$, a diagonalização do termo $\frac{1}{2}g^*\mu_B\sigma_y B$ gera os mesmos autovalores $\pm \frac{1}{2}g^*\mu_B B$ do caso $\theta = 0^\circ$ apresentado na seção anterior. Portanto, o desdobramento de spin $\Delta\varepsilon_s = g^*\mu_B B$ depende apenas do módulo de \mathbf{B} e não de sua direção [12]. Assim, nesta seção será tratado apenas da parte espacial do Hamiltoniano, dada por

$$H_0 = \frac{|\mathbf{p} + e\mathbf{A}|^2}{2m^*} + V(z). \quad (3.21)$$

Os níveis de energia do sistema serão calculados de três maneiras diferentes: Na Seção 3.2.1 o Hamiltoniano H_0 da equação (3.21) será expandido na base $\{|\nu\rangle\}$ utilizada para obter os níveis de energia no caso $\theta = 0^\circ$, e então diagonalizado; na seção seguinte, utilizando a mesma base, os autovalores de H_0 serão calculados através da aplicação de teoria de perturbação não-degenerada; por fim, na Seção 3.2.3 os autovalores serão determinados através da solução analítica de uma equação diferencial obtida da representação espacial do operador H_0 . Os resultados serão apresentados e comparados na Seção 3.2.4, a fim de avaliar a validade de cada método empregado.

3.2.1 Diagonalização na base $\{|\nu\rangle\}$

Para representar o campo magnético \mathbf{B} perpendicular a $\hat{\mathbf{z}}$ utiliza-se o potencial vetor \mathbf{A} dado pelo seguinte calibre:

$$\mathbf{A} = zB \hat{\mathbf{x}} . \quad (3.22)$$

Substituindo (3.22) em (3.21), se obtém

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{eB}{m^*} z p_x + \frac{e^2 B^2}{2m^*} z^2 + \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) , \quad (3.23)$$

onde $V(z)$ é o potencial de poço infinito dado por (3.2). Através do calibre \mathbf{A} em (3.22), pode-se inferir que a função de onda $\psi(\mathbf{r})$ que soluciona a equação de autovalores e autofunções $H_0 \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$ é dada pelo seguinte *ansatz*:

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp [i (k_x x + k_y y)] \phi(z) , \quad (3.24)$$

o que significa que o movimento dos elétrons no plano xy continua livre como se não houvesse campo magnético; no entanto, na direção $\hat{\mathbf{z}}$, além do confinamento do potencial infinito $V(z)$, passa a atuar um potencial adicional representado pela ação do campo magnético \mathbf{B} por meio do potencial vetor \mathbf{A} em (3.22).

Os números quânticos k_x e k_y , que descrevem o movimento dos elétrons no plano xy , são substituídos no Hamiltoniano H_0 em (3.23), utilizando a relação $\mathbf{p} = \hbar \hat{\mathbf{k}}$. Assim,

$$H_0 = \frac{\hbar^2 \hat{k}_x^2}{2m^*} + \hbar \frac{eB}{m^*} z \hat{k}_x + \frac{e^2 B^2}{2m^*} z^2 + \frac{\hbar^2 \hat{k}_y^2}{2m^*} + \frac{p_z^2}{2m^*} + V(z)$$

ou

$$H_0 = \frac{\hbar^2 \hat{k}_y^2}{2m^*} + \frac{p_z^2}{2m^*} + \frac{e^2 B^2}{2m^*} (z + z_0)^2 + V(z) , \quad (3.25)$$

onde $z_0 = \frac{\hbar \hat{k}_x}{eB}$. Assim como no caso $\theta = 0^\circ$, considera-se aqui as componentes k_x e k_y do vetor de onda como bons números quânticos, os quais serão igualados a zero devido ao interesse nos níveis de menor energia. Deste modo, o Hamiltoniano H_0 torna-se

$$H_0 = \frac{p_z^2}{2m^*} + \frac{e^2 B^2}{2m^*} z^2 + V(z) . \quad (3.26)$$

A fim de tornar a variável de posição z adimensional, é realizada a seguinte troca de variáveis:

$$z \rightarrow \frac{L}{\pi} z ,$$

onde L é a largura do poço quântico. Deste modo, a representação espacial do operador Hamiltoniano H_0 passa a ser escrita como

$$H_0 = -\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{e^2 B^2 L^2}{2m^* \pi^2} z^2 + V(z) , \quad (3.27)$$

onde

$$V(z) = \begin{cases} 0 , & |z| < \frac{\pi}{2} \\ \infty , & |z| \geq \frac{\pi}{2} \end{cases} . \quad (3.28)$$

Define-se, então, uma constante de Rydberg efetiva Ry^* , dada por

$$Ry^* = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} . \quad (3.29)$$

Ry^* é a energia de uma partícula de massa efetiva m^* contida no nível fundamental de um poço quântico infinito e unidimensional de largura L , e tal constante é utilizada para tornar as variáveis de energia adimensionais. Assim, o Hamiltoniano da equação (3.27) pode ser reescrito como

$$H_0 = -Ry^* \frac{d^2}{dz^2} + \frac{(\hbar\omega_c)^2}{4Ry^*} z^2 + V(z) , \quad (3.30)$$

onde $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$. Dividindo H_0 por Ry^* se obtém um operador Hamiltoniano adimensional \bar{H}_0 :

$$\bar{H}_0 = -\frac{d^2}{dz^2} + \left(\frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*} \right)^2 z^2 + V(z) . \quad (3.31)$$

Em geral, em problemas envolvendo heteroestruturas na presença de campos externos, as análises dos efeitos sobre os níveis de energia do sistema são realizadas fixando uma grandeza, por exemplo as dimensões do sistema, e variando outra grandeza, como a intensidade do campo aplicado. No entanto, será definida aqui uma variável que engloba tanto a intensidade B do campo magnético aplicado como a largura L do poço quântico. Esta variável,

simbolizada por W_p , é definida como

$$\sqrt{W_p} = \frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*} = \left(\frac{L}{\ell_c\pi} \right)^2 \approx 1.5393 \times 10^{-4} B[\text{T}] L^2[\text{nm}] , \quad (3.32)$$

onde $\ell_c = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$. Portanto, pode-se reescrever o Hamiltoniano \bar{H}_0 de (3.31) como

$$\bar{H}_0 = -\frac{d^2}{dz^2} + W_p z^2 + V(z) . \quad (3.33)$$

Nota-se que o Hamiltoniano adimensional \bar{H}_0 é muito semelhante ao termo H_z de poço infinito (equação (3.10b)) do Hamiltoniano para um campo apontado sobre a direção de crescimento $\hat{\mathbf{z}}$, apresentado na Seção 3.1, a menos do termo proporcional a z^2 , que por meio de W_p carrega os efeitos de campo magnético sobre o subespaço z .

Para obter os autovalores λ_i de \bar{H}_0 deve-se resolver a seguinte equação de autovalores e autovetores:

$$\bar{H}_0 |\psi_i\rangle = \lambda_i |\psi_i\rangle , \quad (3.34)$$

onde os autovetores $|\psi_i\rangle$ são expandidos em termos dos estados $|\nu\rangle$ da base utilizada para o caso $\theta = 0^\circ$ na Seção 3.1:

$$|\psi_i\rangle = \sum_{\nu} A_{\nu} |\nu\rangle . \quad (3.35)$$

Assim, a equação (3.34) torna-se

$$\sum_{\nu} A_{\nu} \bar{H}_0 |\nu\rangle = \lambda_i \sum_{\nu} A_{\nu} |\nu\rangle . \quad (3.36)$$

Multiplicando pela esquerda por $\langle\nu'|\$, e sendo $\{|\nu\rangle\}$ uma base completa e ortonormal, se obtém:

$$\sum_{\nu} \langle\nu'|\bar{H}_0|\nu\rangle A_{\nu} = \lambda_i A_{\nu'} . \quad (3.37)$$

Portanto, deve-se calcular os elementos de matriz $\langle\nu'|\bar{H}_0|\nu\rangle$, construir a matriz hamiltoniana de \bar{H}_0 e diagonalizá-la, a fim de se obter os autovalores λ_i . Os elementos de matriz de \bar{H}_0 são dados por

$$\langle\nu'|\bar{H}_0|\nu\rangle = \langle n', n'_z | \bar{H}_0 | n_z, n \rangle = \delta_{n',n} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) \bar{H}_0 \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz , \quad (3.38)$$

onde n é o índice associado aos níveis de Landau no plano xy , n_z indica os níveis de energia dentro de um poço quântico infinito, e as funções de onda $\phi_{n_z}(\mathbf{z})$ são dadas por

$$\phi_{n_z}(\mathbf{z}) = \langle \mathbf{z} | n_z \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left(n_z z + n_z \frac{\pi}{2} \right). \quad (3.39)$$

Como foi dito no início desta seção, quando o campo magnético \mathbf{B} aponta perpendicularmente à direção $\hat{\mathbf{z}}$ os níveis de Landau tornam-se degenerados. Neste caso, a delta de Kronecker $\delta_{n',n}$ em (3.38) sempre resultará no valor 1, e pode-se excluir o número quântico n da notação da base $\{|\nu\rangle\}$, simplificando para $\{|n_z\rangle\}$.

Levando em consideração a limitação espacial imposta pelo potencial infinito $V(\mathbf{z})$ (equação (3.28)), o elemento de matriz de \bar{H}_0 em (3.38) é reescrito como

$$\begin{aligned} \langle n'_z | \bar{H}_0 | n_z \rangle &= - \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) \frac{d^2}{dz^2} \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz + W_p \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) z^2 \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz \\ &= n_z^2 \delta_{n'_z, n_z} + W_p \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) z^2 \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz, \end{aligned} \quad (3.40)$$

onde

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) z^2 \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz = \begin{cases} \frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2n_z^2} & , n'_z = n_z \\ 4n'_z n_z \frac{[1 + (-1)^{n'_z + n_z}]}{(n'^2_z - n_z^2)^2} & , n'_z \neq n_z \end{cases} \quad (3.41)$$

Observe que se o termo n_z^2 for multiplicado por $Ry^* = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2}$ se obtém justamente o valor de energia dos níveis discretos dentro de um poço quântico infinito de largura L (ver equação (3.14)). Portanto, aos elementos de matriz diagonais n_z^2 presentes no Hamiltoniano no caso sem campo magnético são somadas contribuições diagonais e não-diagonais, dadas pelo produto de (3.41) por W_p , o que leva a acoplamentos entre sub-bandas n_z de mesma paridade.

A matriz de \bar{H}_0 expandido na base $\{|n_z\rangle\}$ tem dimensão infinita, mas pode ser truncada em aplicações práticas. Para o cálculo dos elementos de matriz foram considerados os primeiros doze níveis dentro do poço infinito, $n_z = 1, 2, 3, \dots, 12$. Os primeiros quatro níveis são plotados em relação a W_p na Figura 3.4 da Seção 3.2.4, juntamente com os autovalores obtidos a partir dos métodos apresentados nas próximas duas seções.

3.2.2 Teoria de perturbação

Nesta seção a determinação das auto-energias no interior de um poço quântico infinito, na presença de um campo magnético \mathbf{B} perpendicular à direção de crescimento do poço, é realizada por meio da teoria de perturbação não-degenerada. Enquanto o sistema não-perturbado é dado pelo elétron confinado no poço infinito $V(z)$ (equação (3.2)), a perturbação é representada pelo campo magnético aplicado sobre o sistema.

Parte-se do Hamiltoniano adimensional da equação (3.33):

$$\bar{H}_0 = -\frac{d^2}{dz^2} + W_p z^2 + V(z) . \quad (3.42)$$

O Hamiltoniano \bar{H}_0 pode ser escrito como

$$\bar{H}_0 = \bar{H}^{(0)} + \delta\bar{H} , \quad (3.43)$$

onde a parte não-perturbada $\bar{H}^{(0)}$ é o Hamiltoniano adimensional de um poço infinito, sem campo magnético:

$$\bar{H}^{(0)} = -\frac{d^2}{dz^2} + V(z) , \quad (3.44)$$

e a perturbação $\delta\bar{H}$ é dada por

$$\delta\bar{H} = W_p z^2 , \quad (3.45)$$

sendo que o campo magnético está implícito na variável W_p .

As soluções não-perturbadas $\psi^{(0)}$ são dadas pelas auto-funções de um poço quântico infinito $\phi_{n_z}(\mathbf{z})$, representadas pela equação (3.39), lembrando que \mathbf{z} é uma variável adimensional, dada por $\mathbf{z} = \frac{L}{\pi}z$. Para a energia serão consideradas perturbações de primeira e segunda ordem. Portanto, os autovalores adimensionais são escritos como segue:

$$\lambda_{n_z} = \lambda_{n_z}^{(0)} + \lambda_{n_z}^{(1)} + \lambda_{n_z}^{(2)} , \quad (3.46)$$

onde os superíndices 0, 1 e 2 indicam o termo não-perturbado, a contribuição perturbativa de primeira ordem e o termo perturbativo de segunda ordem, respectivamente.

A aplicação de $\bar{H}^{(0)}$ sobre as auto-funções $\phi_{n_z}(\mathbf{z})$ resulta nos autovalores adimensionais não-perturbados $\lambda_{n_z}^{(0)}$:

$$\begin{aligned} \bar{H}^{(0)} \phi_{n_z}(\mathbf{z}) &= \lambda_{n_z}^{(0)} \phi_{n_z}(\mathbf{z}) \\ - \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) \frac{d^2}{dz^2} \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz &= \lambda_{n_z}^{(0)} \delta_{n'_z, n_z} , \end{aligned}$$

ou

$$\lambda_{n_z}^{(0)} = n_z^2 . \quad (3.47)$$

O termo perturbativo de primeira ordem $\lambda_{n_z}^{(1)}$ é dado pelo seguinte elemento de matriz:

$$\lambda_{n_z}^{(1)} = \langle n_z | \delta \bar{H} | n_z \rangle = W_p \langle n_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle$$

ou

$$\lambda_{n_z}^{(1)} = W_p \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n_z}^*(\mathbf{z}) \mathbf{z}^2 \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz , \quad (3.48)$$

onde

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n_z}^*(\mathbf{z}) \mathbf{z}^2 \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz = \frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2n_z^2} . \quad (3.49)$$

O termo perturbativo de ordem 2 é dado pela seguinte relação:

$$\lambda_{n_z}^{(2)} = \sum_{n'_z \neq n_z} \frac{|\langle n'_z | \delta \bar{H} | n_z \rangle|^2}{\lambda_{n_z}^{(0)} - \lambda_{n'_z}^{(0)}} ,$$

ou

$$\lambda_{n_z}^{(2)} = W_p^2 \sum_{n'_z \neq n_z} \frac{|\langle n'_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle|^2}{n_z^2 - n'^2_z} , \quad (3.50)$$

onde

$$\langle n'_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) \mathbf{z}^2 \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz = 4n'_z n_z \frac{[1 + (-1)^{n'_z + n_z}]}{(n'^2_z - n_z^2)^2} \Big|_{n'_z \neq n_z} . \quad (3.51)$$

Substituindo (3.47), (3.48) e (3.50) em (3.46), obtém-se a seguinte relação para os autovalores adimensionais de \bar{H}_0 , obtidos por teoria de perturbação de primeira e segunda

ordem:

$$\lambda_{n_z} = n_z^2 + W_p \left(\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2n_z^2} \right) + 16 W_p^2 n_z^2 \sum_{n'_z \neq n_z} n'_z{}^2 \frac{[1 + (-1)^{n'_z + n_z}]^2}{(n'_z{}^2 - n_z^2)^5}. \quad (3.52)$$

A soma em (3.52) é realizada para infinitos valores de n'_z , mas converge para poucos termos. Uma comparação entre os autovalores λ_{n_z} calculados por teoria de perturbação não-degenerada, e os autovalores obtidos pelos métodos apresentados na seção anterior e na próxima, é apresentada na Seção 3.2.4.

3.2.3 Solução analítica

Para esta seção são considerados os mesmos passos matemáticos descritos anteriormente, desde a parte espacial do Hamiltoniano H (H_0 , dado pela equação (3.21)), utilizando o potencial vetor da equação (3.22) e chegando no Hamiltoniano da equação (3.25):

$$H_0 = \frac{\hbar^2 \hat{k}_y^2}{2m^*} + \frac{p_z^2}{2m^*} + \frac{e^2 B^2}{2m^*} (z + z_0)^2 + V(z), \quad (3.53)$$

onde $z_0 = \frac{\hbar \hat{k}_x}{eB}$. Os níveis de energia E do sistema são obtidos através da seguinte relação de autovalores e auto-funções:

$$H_0 \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (3.54)$$

onde $\psi(\mathbf{r})$ pode ser dada pelo *ansatz* da equação (3.24):

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp[i(k_x x + k_y y)] \phi(z), \quad (3.55)$$

isto é, considera-se que o movimento dos elétrons é livre no plano xy e ligado em z , descrito pela função $\phi(z)$. Substituindo (3.53) em (3.54), obtém-se

$$\left[\frac{p_z^2}{2m^*} + \frac{e^2 B^2}{2m^*} (z + z_0)^2 + V(z) + \frac{\hbar^2 \hat{k}_y^2}{2m^*} \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}). \quad (3.56)$$

O termo $\frac{\hbar^2 \hat{k}_y^2}{2m^*}$, ao atuar sobre a função de onda $\psi(\mathbf{r})$, gera o autovalor $\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}$. Como os outros termos de H_0 estão associados apenas ao sub-espço z , pode-se reduzir a equação de

Schrödinger (3.56) apenas às funções $\phi(z)$:

$$\left[\frac{p_z^2}{2m^*} + \frac{e^2 B^2}{2m^*} (z + z_0)^2 + V(z) \right] \phi(z) = \varepsilon_z \phi(z), \quad (3.57)$$

onde $\varepsilon_z = E - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}$. Assim, no interior do poço infinito ($V(z) = 0$),

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{e^2 B^2}{2m^*} (z + z_0)^2 - \varepsilon_z \right] \phi(z) = 0, \quad (3.58)$$

sendo que, nas barreiras infinitas, $\phi(z = \pm L/2) = 0$.

Da mesma maneira que nas seções 3.2.1 e 3.2.2 será realizada a seguinte troca de variáveis, a fim de tornar a variável de posição z adimensional:

$$z \rightarrow \frac{L}{\pi} \mathbf{z} .$$

Realizando esta troca na equação (3.58), obtém-se

$$\left[-\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{e^2 B^2 L^2}{2m^* \pi^2} (\mathbf{z} + \mathbf{z}_0)^2 - \varepsilon_z \right] \phi(\mathbf{z}) = 0 . \quad (3.59)$$

Pode-se escrever a equação (3.59) em termos da constante de Rydberg efetiva Ry^* , definida pela equação (3.29):

$$Ry^* = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} .$$

Assim,

$$\left[-Ry^* \frac{d^2}{dz^2} + \frac{(\hbar\omega_c)^2}{4Ry^*} (\mathbf{z} + \mathbf{z}_0)^2 - \varepsilon_z \right] \phi(\mathbf{z}) = 0 , \quad (3.60)$$

onde $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$. Dividindo a equação (3.60) por Ry^* , se obtém a seguinte relação:

$$\left[-\frac{d^2}{dz^2} + W_p (\mathbf{z} + \mathbf{z}_0)^2 - \lambda \right] \phi(\mathbf{z}) = 0 , \quad (3.61)$$

onde W_p , definido pela equação (3.32), engloba tanto os efeitos do campo magnético \mathbf{B} como da largura L do poço quântico infinito. Além disso, $\lambda = \frac{\varepsilon_z}{Ry^*}$ denota os autovalores adimensionais do sistema. Para determinar λ é necessário antes encontrar as funções $\phi(\mathbf{z})$ que, dentro de determinadas condições de contorno, solucionam a equação diferencial (3.61).

Primeiramente, realizam-se as seguintes trocas de variáveis:

$$z + z_0 = \frac{x}{\alpha} \quad , \quad \eta = -2\alpha^2\lambda \quad , \quad (3.62)$$

onde α é uma constante a ser determinada. Assim, a equação (3.61) pode ser reescrita como

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \alpha^4 W_p x^2 - \frac{\eta}{2} \right] f(x) = 0 \quad . \quad (3.63)$$

Segundo a Ref. [39], a equação diferencial abaixo

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{4}x^2 - \frac{\eta}{2} \right] f(x) = 0 \quad (3.64)$$

tem soluções pares e ímpares dadas respectivamente por

$$f^{(p)}(x) = \exp\left(\frac{-x^2}{4}\right) \mathcal{M}\left(\frac{-\eta+1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{x^2}{2}\right) \quad , \quad (3.65a)$$

$$f^{(i)}(x) = x \exp\left(\frac{-x^2}{4}\right) \mathcal{M}\left(\frac{-\eta+3}{4}, \frac{3}{2}, \frac{x^2}{2}\right) \quad , \quad (3.65b)$$

onde $\mathcal{M}(a, b, x)$ é uma função hipergeométrica confluyente [39]. A solução geral é obtida pela combinação linear das soluções pares e ímpares:

$$f(x) = \exp\left(\frac{-x^2}{4}\right) \left[C_1 \mathcal{M}\left(\frac{-\eta+1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{x^2}{2}\right) + C_2 x \mathcal{M}\left(\frac{-\eta+3}{4}, \frac{3}{2}, \frac{x^2}{2}\right) \right] \quad . \quad (3.66)$$

Portanto, deve-se igualar o fator $\alpha^4 W_p$ (equação (3.63)) a $1/4$, de onde segue que

$$\alpha = \frac{1}{(4W_p)^{1/4}} \quad (3.67)$$

Pode-se indexar em 1 e 2 os pontos limítrofes do poço quântico infinito, sendo

$$z_{1,2} = \pm \frac{L}{2} \quad \rightarrow \quad z_{1,2} = \pm \frac{\pi}{2} \quad , \quad (3.68)$$

e, além disso, $\mathbf{z}_0 = \frac{\sqrt{W_p}}{\pi} \hat{k}_x$. A partir da equação (3.62) obtém-se

$$\mathbf{x}_{1,2} = \frac{1}{(4W_p)^{1/4}} \left(\pm \frac{\pi}{2} + \frac{\sqrt{W_p}}{\pi} \hat{k}_x \right) \quad (3.69)$$

Considerando as condições de contorno $f(\mathbf{x}_1) = f(\mathbf{x}_2) = 0$, se obtém a seguinte equação:

$$\begin{aligned} & \mathbf{x}_2 \mathcal{M} \left(\frac{-\eta_i + 1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{-\mathbf{x}_1^2}{2} \right) \mathcal{M} \left(\frac{-\eta_i + 3}{4}, \frac{3}{2}, \frac{-\mathbf{x}_2^2}{2} \right) \\ &= \mathbf{x}_1 \mathcal{M} \left(\frac{-\eta_i + 1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{-\mathbf{x}_2^2}{2} \right) \mathcal{M} \left(\frac{-\eta_i + 3}{4}, \frac{3}{2}, \frac{-\mathbf{x}_1^2}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.70)$$

onde os valores η_i são quantizados e estão relacionados às funções $f(\mathbf{x})$ que satisfazem a condição de contorno $f(\mathbf{x}_1) = f(\mathbf{x}_2) = 0$, isto é, zeram nas paredes do poço quântico infinito. Por meio da relação (3.62) pode-se obter um conjunto de autovalores λ_i , dados por

$$\lambda_i = -\sqrt{W_p} \eta_i. \quad (3.71)$$

Como nas duas últimas seções, serão tomados $k_x = k_y = 0$. Tem-se, assim, o caso simétrico, onde

$$\mathbf{x}_1 = -\mathbf{x}_2 \quad \rightarrow \quad \mathbf{x}_0 = \frac{\pi\sqrt{2}}{4 W_p^{1/4}}. \quad (3.72)$$

Neste caso, as soluções pares e ímpares são independentes, sendo que

$$f^{(p)}(\mathbf{x}_0) = f^{(i)}(\mathbf{x}_0) = 0. \quad (3.73)$$

Há, portanto, infinitos valores quantizados η_i para os quais as funções pares e ímpares, dadas pela equação (3.65), satisfazem a condição de contorno (3.73). Por outro lado cada largura L do poço quântico infinito e cada intensidade B do campo magnético correspondem a um valor de W_p . A partir da equação (3.71), para cada valor de W_p há um conjunto infinito de valores λ_i , os quais são os autovalores do sistema. Estes autovalores λ_i são análogos aos autovalores adimensionais calculados na Seção 3.2.1 por expansão e diagonalização de \bar{H}_0 (equação (3.33)) na base $\{|n_z\rangle\}$, e na Seção 3.2.2 por teoria de perturbação de primeira e segunda ordem, e podem ser escritos como λ_{n_z} . Os resultados calculados para λ_{n_z} em função de W_p são apresentados na próxima seção.

3.2.4 Análise dos resultados

A partir dos métodos descritos nas seções 3.2.1, 3.2.2 e 3.2.3 foram determinados os quatro primeiros autovalores adimensionais λ_{n_z} para um poço infinito e unidimensional em z , na presença de um campo magnético \mathbf{B} perpendicular a $\hat{\mathbf{z}}$. Os autovalores λ_{n_z} foram plotados em função de W_p , como mostra a Figura 3.4. As linhas vermelhas indicam os autovalores calculados a partir da diagonalização de \bar{H}_0 (equação (3.33)) expandido na base $\{|n_z\rangle\}$; as curvas em azul denotam os autovalores obtido por teoria de perturbação não-degenerada de primeira e segunda ordem, onde os estados da base $\{|n_z\rangle\}$ são tratados como estados não-perturbados; e os símbolos em preto representam os autovalores calculados pelo método analítico descrito na seção anterior, obtidos para cada valor de W_p considerado.

Observa-se, na Figura 3.4, que em W_p igual a zero, equivalente ao caso sem campo magnético, os autovalores λ_{n_z} são dados simplesmente por n_z^2 . Com o aumento de W_p , no caso de diagonalização, os autovalores variam de maneira praticamente linear em função de W_p , como indica a equação (3.40). Para os resultados de teoria de perturbação, o aumento de W_p implica no aparecimento dos efeitos dos termos perturbativos $\lambda_{n_z}^{(1)}$ e $\lambda_{n_z}^{(2)}$, tais como a dependência linear e quadrática com W_p , e acoplamentos entre níveis n_z e n'_z de mesma paridade.

Observa-se uma grande concordância entre os autovalores calculados pelos três métodos, para um valor de W_p menor ou igual a 5, que corresponde a um campo magnético de intensidade 20 teslas aplicado sobre uma heteroestrutura de poço quântico de largura $L \approx 27$ nm, valores estes considerados elevados. Portanto, até um limite alto, a teoria de perturbação, utilizando a base $\{|n_z\rangle\}$, se mostra uma boa ferramenta no cálculos dos autovalores λ_{n_z} . Propositamente, os autovalores foram plotados em relação a W_p para um valor máximo igual a 10. Isto foi feito para mostrar que aumentando muito a largura L do poço de potencial confinador ou a intensidade B do campo magnético, os resultados perturbativos passam a divergir dos resultados obtidos pela solução analítica da equação diferencial (3.63) (ou seja, para $W_p > 5$ os termos $\lambda_{n_z}^{(1)}$ e $\lambda_{n_z}^{(2)}$ não podem ser tratados apenas como perturbações a serem somadas a $\lambda_{n_z}^{(0)}$). No entanto, os autovalores obtidos pela expansão e diagonalização de \bar{H}_0 na base $\{|n_z\rangle\}$ ainda apresentam uma ótima concordância com os resultados calculados utilizando a base dada pelas funções pares e ímpares em (3.65), com a vantagem da base $\{|n_z\rangle\}$ ser composta por funções seno, mostrando simplicidade diante da base dada por funções

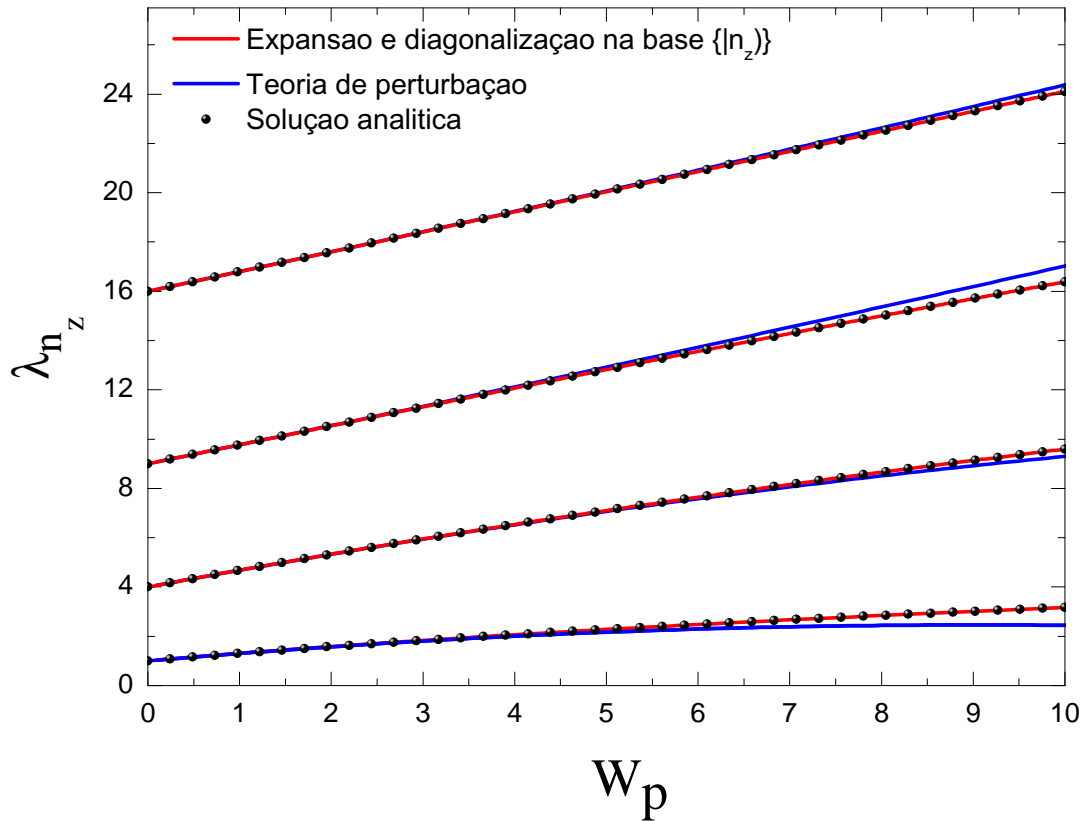


FIGURA 3.4: Quatro primeiros autovalores adimensionais λ_{n_z} em um poço quântico infinito na presença de um campo magnético \mathbf{B} perpendicular à sua direção de crescimento. Estão representados os resultados obtidos pelos três métodos apresentados na Seção 3.2, e observa-se que os resultados concordam entre si para W_p menor ou igual a cinco, o qual já corresponde a valores elevados de campo magnético e largura do poço quântico. Para W_p entre 5 e 10, os resultados de teoria de perturbação divergem daqueles obtidos pelos outros dois métodos.

hipergeométricas, como tratado na seção anterior. A boa concordância mostrada na Figura 3.4 dá confiança à utilização da base $\{|n_z\rangle\}$ para solucionar o problema em z . Portanto, na próxima seção, a base $\{|\nu\rangle\} = \{|n_z, n\rangle\}$, que soluciona o caso de campo paralelo (Seção 3.1) e se mostrou competente no caso de campo perpendicular (Seção 3.2), será aplicada ao caso de campo magnético inclinado, por meio do método de expansão e diagonalização do Hamiltoniano do sistema, e por teoria de perturbação.

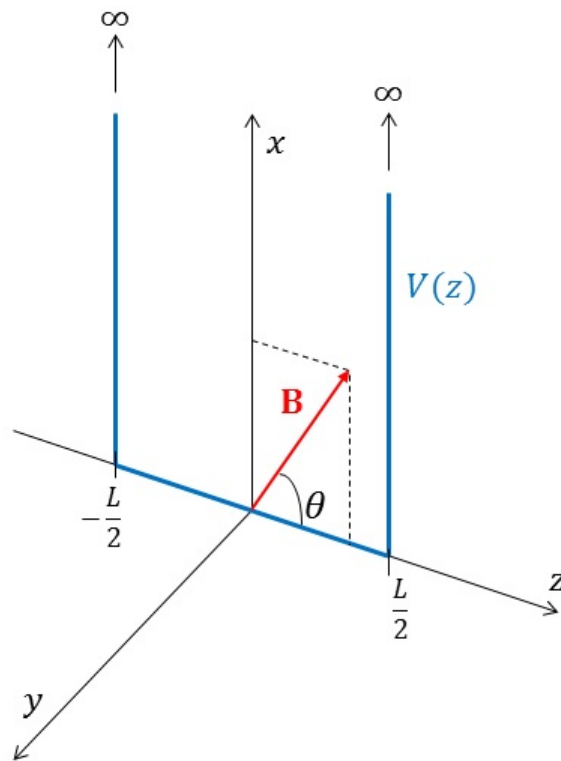


FIGURA 3.5: Representação de um sistema composto por um poço quântico infinito e unidimensional em z de largura L , na presença de um campo magnético \mathbf{B} posicionado no plano xz e inclinado por um ângulo θ em relação à direção $\hat{\mathbf{z}}$.

3.3 Campo inclinado

Esta seção trata do caso de uma heteroestrutura representada por um poço quântico infinito de largura L , na presença de um campo magnético de intensidade B e inclinado por um ângulo θ em relação à direção de crescimento $\hat{\mathbf{z}}$ da heteroestrutura. O sistema é representado esquematicamente na Figura 3.5, e nota-se que o campo magnético \mathbf{B} está posicionado sobre o plano xz e é dado por:

$$\mathbf{B} = B \sin(\theta) \hat{\mathbf{x}} + B \cos(\theta) \hat{\mathbf{z}} . \quad (3.74)$$

Assim como nas seções 3.1 e 3.2, busca-se aqui determinar o espectro de energia na banda de condução dentro de um poço infinito e unidimensional em z . Portanto, utiliza-se

o Hamiltoniano de massa efetiva (3.1):

$$H = \frac{|\mathbf{p} + e\mathbf{A}|^2}{2m^*} + V(z) + \frac{g^*}{2}\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} , \quad (3.75)$$

onde o potencial vetor \mathbf{A} , utilizado para representar o campo magnético (3.74), é dado pelo seguinte calibre:

$$\mathbf{A} = (xB_z - zB_x) \hat{\mathbf{y}} , \quad (3.76)$$

onde $B_x = B \sin(\theta)$ e $B_z = B \cos(\theta)$.

Observa-se no Hamiltoniano da equação (3.75) que os termos orbitais e de spin são separados. Desta forma, como nos casos $\theta = 0^\circ$ e $\theta = 90^\circ$, as soluções orbitais e de spin são também separáveis (ver equação (3.7)). As soluções da parte de spin,

$$\frac{g^*}{2}\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \frac{g^*}{2}\mu_B (\sigma_x B_x + \sigma_z B_z) , \quad (3.77)$$

são representadas pelos autoestados de σ_z , $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, sendo

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} , \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} . \quad (3.78)$$

A diagonalização do termo de spin em (3.77) gera os autovalores $\pm \frac{g^*}{2}\mu_B B$ e o desdobramento de spin $\Delta\varepsilon_s = g^*\mu_B B$, da mesma forma que nos casos $\theta = 0^\circ$ e $\theta = 90^\circ$. Portanto, assim como na Seção 3.2, será discutida aqui apenas a parte orbital de H :

$$H_0 = \frac{|\mathbf{p} + e\mathbf{A}|^2}{2m^*} + V(z) . \quad (3.79)$$

Substituindo o potencial vetor de (3.76) em (3.79), se obtém

$$\begin{aligned} H_0 = & \frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) + \frac{1}{2m^*} [p_y^2 - 2eB_x z p_y + e^2 B_x^2 z^2] \\ & + \frac{1}{2m^*} [p_x^2 + 2eB_z x p_y + e^2 B_z^2 x^2] - \frac{e^2 B_x B_z}{m^*} xz . \end{aligned} \quad (3.80)$$

Pode-se inferir, a partir das equações (3.76) e (3.80), que a função de onda $\psi(\mathbf{r})$, a qual soluciona a equação de autovalores e auto-funções $H_0 \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$, é dada por

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(ik_y y) \phi(x, z) . \quad (3.81)$$

Portanto, na direção $\hat{\mathbf{y}}$ o movimento do elétron é livre e descrito por uma função de onda plana de número de onda k_y . No caso de uma heteroestrutura de poço quântico, em que há um potencial externo $V(z)$ de confinamento, o vetor de onda \mathbf{k} torna-se um operador, dado por $\frac{\mathbf{p}}{\hbar}$. Assim, pode-se reescrever o Hamiltoniano H_0 em (3.80) como

$$H_0 = H_z + H_x + \delta H_{xz} + \delta H_z , \quad (3.82a)$$

onde

$$H_z = \frac{p_z^2}{2m^*} + V(z) , \quad (3.82b)$$

$$H_x = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{e^2 B_z^2}{2m^*} (x - x_0)^2 - \frac{\hbar^2 \hat{k}_y^2}{2m^*} , \quad (3.82c)$$

$$\delta H_z = \frac{e^2 B_x^2}{2m^*} (z - z_0)^2 , \quad (3.82d)$$

$$\delta H_{xz} = -\frac{e^2 B_x B_z}{m^*} xz , \quad (3.82e)$$

sendo $x_0 = -\frac{\hbar \hat{k}_y}{eB_z}$ e $z_0 = \frac{\hbar \hat{k}_y}{eB_x}$. Observa-se que os termos H_z e H_x em (3.82b) e (3.82c) são análogos, respectivamente, aos termos (3.10b) e (3.10c) do caso $\theta = 0^\circ$ da Seção 3.1. No entanto, os termos (3.82d) e (3.82e) surgem apenas no caso $\theta \neq 0^\circ$, e portanto se diz que os mesmos carregam os efeitos de campo inclinado.

Na Seção 3.3.1 o Hamiltoniano em (3.82) será expandido na base $\{|\nu\rangle\} = \{|n_z, n\rangle\}$ e diagonalizado, a fim de determinar os autovalores de energia do sistema; já na Seção 3.3.2 os autovalores serão determinado pela aplicação de teoria de perturbação, utilizando a mesma base $\{|n_z, n\rangle\}$.

3.3.1 Diagonalização na base $\{|\nu\rangle\}$

Deve-se determinar aqui os níveis de energia em um poço quântico infinito de largura L , na presença de um campo magnético inclinado de intensidade B e dado pela equação

(3.74). Portanto é necessário resolver a seguinte equação de autovalores e autovetores:

$$H_0 |\psi_i\rangle = \varepsilon_i |\psi_i\rangle . \quad (3.83)$$

Os autoestados $|\psi_i\rangle$ são expandidos na base $\{|\nu\rangle\} = \{|n_z, n\rangle\}$:

$$|\psi_i\rangle = \sum_{n_z, n} A_{n_z, n} |n_z, n\rangle . \quad (3.84)$$

Substituindo (3.84) em (3.83) se obtém:

$$\sum_{n_z, n} A_{n_z, n} H_0 |n_z, n\rangle = \varepsilon_i \sum_{n_z, n} A_{n_z, n} |n_z, n\rangle . \quad (3.85)$$

Multiplicando pela esquerda por $\langle n', n'_z|$:

$$\sum_{n_z, n} \langle n', n'_z| H_0 |n_z, n\rangle A_{n_z, n} = \varepsilon_i A_{n_z, n} . \quad (3.86)$$

A equação (3.86) tem a forma de uma equação de autovalores e autovetores, os quais são dados por ε_i e pelos coeficientes $A_{n_z, n}$, respectivamente. Para determiná-los, é necessário calcular os elementos de matriz de H_0 , e diagonalizar a matriz gerada.

Com o intuito de tornar a variável z adimensional, realiza-se a seguinte troca de variáveis:

$$z \rightarrow \frac{L}{\pi} z .$$

Desta forma, o termo H_z de (3.82b) pode ser escrito como

$$H_z = -\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) , \quad (3.87)$$

onde

$$V(z) = \begin{cases} 0 , & |z| < \frac{\pi}{2} \\ \infty , & |z| \geq \frac{\pi}{2} \end{cases} . \quad (3.88)$$

Assim como na Seção 3.2.1 será utilizada a constante de Rydberg efetiva Ry^* , dada pela equação (3.29),

$$Ry^* = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} ,$$

a fim de tornar os termos de energia adimensionais. Portanto, escrevendo H_z em termos de Ry^* , se obtém

$$\bar{H}_z = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z), \quad (3.89)$$

onde $\bar{H}_z = \frac{H_z}{Ry^*}$. O elemento de matriz de \bar{H}_z é dado por

$$\langle n', n'_z | \bar{H}_z | n_z, n \rangle = \delta_{n',n} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n'_z}^*(z) \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi_{n_z}(z) dz = n_z^2 \delta_{n'_z, n_z} \delta_{n', n}, \quad (3.90)$$

onde

$$\phi_{n_z}(z) = \langle z | n_z \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left(n_z z + n_z \frac{\pi}{2} \right) \quad (3.91)$$

são as auto-funções de um poço de potencial infinito de largura adimensional π .

O termo H_x é dado por (3.82c):

$$H_x = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{e^2 B_z^2}{2m^*} (x - x_0)^2 - \frac{\hbar^2 \hat{k}_y^2}{2m^*}. \quad (3.92)$$

Como já foi dito nas seções anteriores, k_y é um bom número quântico e descreve o movimento livre dos elétrons na direção \hat{y} (equação (3.81)). Tomando-o igual a zero, o termo H_x em (3.92) é reescrito como

$$H_x = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{m^* \omega_z^2}{2} x^2, \quad (3.93)$$

onde $\omega_z = \frac{eB_z}{m^*} = \omega_c \cos(\theta)$. O termo H_x tem a forma do Hamiltoniano de um oscilador harmônico unidimensional em x e centrado na origem, cuja frequência de oscilação é dada pela frequência ciclotrônica ω_z , isto é, a frequência ciclotrônica ω_c considerando apenas a componente z do campo magnético: $B \cos(\theta)$. Obviamente, no caso $\theta = 0^\circ$, $\omega_z = \omega_c$, como mostra a equação (3.10c).

Os autoestados de H_x são dados pelos estados $|n\rangle$, análogos aos estados de um oscilador harmônico unidimensional. As auto-funções $\varphi_n(x)$ são dadas por

$$\varphi_n(x) = \langle x | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \ell_z \sqrt{\pi}}} \exp \left(-\frac{x^2}{2\ell_z} \right) \mathcal{H}_n \left(\frac{x}{\ell_z} \right),$$

ou

$$\varphi_n(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{\mathbf{x}^2}{2}\right) \mathcal{H}_n(\mathbf{x}) , \quad (3.94)$$

onde, para tornar a variável de posição x adimensional, é realizada a seguinte troca de variáveis:

$$x \rightarrow \ell_z \mathbf{x} ,$$

sendo $\ell_z = \sqrt{\frac{\hbar}{eB_z}}$ o comprimento magnético associado à componente z do campo magnético ($B_z = B \cos(\theta)$).

A atuação de H_x sobre as auto-funções $\varphi_n(\mathbf{x})$ gera os níveis de Landau, dados por (3.17) multiplicado por $\cos(\theta)$:

$$H_x \varphi_n(\mathbf{x}) = \hbar\omega_z \left(n + \frac{1}{2}\right) \varphi_n(\mathbf{x}) = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) \cos(\theta) \varphi_n(\mathbf{x}) \quad (3.95)$$

Como será visto, o fator cosseno gera uma aproximação dos níveis adjacentes com o aumento do ângulo θ , desde $\theta = 0^\circ$. Isto explica o fato dos níveis de Landau degenerarem em $\theta = 90^\circ$, como foi discutido na Seção 3.2. Definindo $\bar{H}_x = \frac{H_x}{Ry^*}$, seus elementos de matriz são dados por

$$\langle n', n'_z | \bar{H}_x | n_z, n \rangle = \delta_{n'_z, n_z} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{n'}^*(\mathbf{x}) \bar{H}_x \varphi_n(\mathbf{x}) dx = \frac{\hbar\omega_z}{Ry^*} \left(n + \frac{1}{2}\right) \delta_{n', n} \delta_{n'_z, n_z} . \quad (3.96)$$

Pode-se escrever o elemento de matriz de (3.96) em função da variável W_p introduzida na seção anterior e dada pela equação (3.32):

$$\sqrt{W_p} = \frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*} = \left(\frac{L}{\ell_c \pi}\right)^2 \approx 1.5393 \times 10^{-4} B[\text{T}] L^2[\text{nm}] , \quad (3.97)$$

Assim,

$$\langle n', n'_z | \bar{H}_x | n_z, n \rangle = 2\sqrt{W_p} \cos(\theta) \left(n + \frac{1}{2}\right) \delta_{n'_z, n_z} \delta_{n', n} , \quad (3.98)$$

Considerando $k_y = 0$ e a troca de variáveis $z \rightarrow \frac{L}{\pi} \mathbf{z}$, o termo δH_z de (3.82d) é reescrito como

$$\delta H_z = \frac{e^2 B^2 \sin^2(\theta) L^2}{2m^* \pi^2} \mathbf{z}^2 = \frac{\hbar^2 e^2 B^2}{4m^{*2}} \left(\frac{2m^* L^2}{\hbar^2 \pi^2}\right) \mathbf{z}^2 \sin^2(\theta) = \frac{(\hbar\omega_c)^2}{4Ry^*} \mathbf{z}^2 \sin^2(\theta) . \quad (3.99)$$

O elemento de matriz de $\delta\bar{H}_z = \frac{\delta H_z}{Ry^*}$ é dado por

$$\langle n', n'_z | \delta\bar{H}_z | n_z, n \rangle = \left(\frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*} \right)^2 \sin^2(\theta) \delta_{n',n} \langle n'_z | z^2 | n_z \rangle ,$$

ou

$$\boxed{\langle n', n'_z | \delta\bar{H}_z | n_z, n \rangle = W_p \sin^2(\theta) \delta_{n',n} \langle n'_z | z^2 | n_z \rangle ,} \quad (3.100)$$

onde

$$\langle n'_z | z^2 | n_z \rangle = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n'_z}^*(z) z^2 \phi_{n_z}(z) dz = \begin{cases} \frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2n_z^2} & , n'_z = n_z \\ 4n'_z n_z \frac{[1 + (-1)^{n'_z + n_z}]}{(n_z'^2 - n_z^2)^2} & , n'_z \neq n_z \end{cases} . \quad (3.101)$$

O termo $\delta\bar{H}_z$, por meio do operador z^2 , é responsável, primeiramente, por acoplar sub-bandas n_z com elas mesmas, somando um valor de energia aos elementos diagonais do Hamiltoniano \bar{H}_0 . Além disso, $\delta\bar{H}_z$ acopla sub-bandas n_z diferentes e com mesma paridade.

Uma das peculiaridades do caso $\theta = 0^\circ$ é a independência entre os estados do subespaço z , $|n_z\rangle$, e do subespaço x , $|n\rangle$. Isto é observado no gráfico dos ramos de energia em função de B apresentado na Figura 3.2, onde os níveis variam com o campo magnético, sem "enxergar" uns aos outros. O mesmo não ocorre no caso de campo inclinado, onde surgem interações entre estados do subespaço z , a partir do termo δH_z , e acoplamentos entre os subespaços x e z , a partir da atuação de δH_{xz} , dado por (3.82e):

$$\delta H_{xz} = -\frac{e^2 B_x B_z}{m^*} xz = -\frac{e^2 B^2}{m^*} \sin(\theta) \cos(\theta) xz . \quad (3.102)$$

Utilizando as variáveis reduzidas $\mathbf{z} = \frac{\pi}{L}z$ e $\mathbf{x} = \frac{x}{\ell_z}$, onde $\ell_z = \sqrt{\frac{\hbar}{eB \cos(\theta)}}$, pode-se reescrever (3.102) como

$$\begin{aligned} \delta H_{xz} &= -\frac{e^2 B^2}{m^*} \sin(\theta) \cos(\theta) \left(\sqrt{\frac{\hbar}{eB \cos(\theta)}} \mathbf{x} \right) \frac{L}{\pi} \mathbf{z} \\ &= -\sqrt{\frac{eB}{\hbar}} \sin(\theta) \sqrt{\cos(\theta)} \frac{1}{\ell_c^2} \left(\frac{L}{\pi} \right)^3 \left(\hbar \omega_c \frac{\pi^2 \ell_c^2}{L^2} \right) \mathbf{x} \mathbf{z} \\ &= -\sin(\theta) \sqrt{\cos(\theta)} \left(\frac{L}{\pi \ell_c} \right)^3 (2Ry^*) \mathbf{x} \mathbf{z} \\ &= -2Ry^* \sin(\theta) \sqrt{\cos(\theta)} (W_p)^{3/4} \mathbf{x} \mathbf{z} , \end{aligned} \quad (3.103)$$

onde $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ e $\ell_c = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$. O elemento de matriz de $\delta \bar{H}_{xz} = \frac{\delta H_{xz}}{Ry^*}$ é dado por

$$\langle n', n'_z | \delta \bar{H}_{xz} | n_z, n \rangle = -2 \sin(\theta) \sqrt{\cos(\theta)} W_p^{3/4} \langle n' | \mathbf{x} | n \rangle \langle n'_z | \mathbf{z} | n_z \rangle . \quad (3.104)$$

O operador \mathbf{x} , escrito em termos de operadores de criação, \hat{a}^\dagger , e aniquilação, \hat{a} , é dado por [40]

$$\mathbf{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) , \quad (3.105)$$

sendo que a atuação dos operadores \hat{a} e \hat{a}^\dagger sobre os estados $|n\rangle$ se dá como segue:

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle ; \quad (3.106a)$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle . \quad (3.106b)$$

Portanto,

$$\langle n' | \mathbf{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n', n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n', n+1} . \quad (3.107)$$

Além disso,

$$\langle n'_z | \mathbf{z} | n_z \rangle = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) \mathbf{z} \phi_{n_z}(\mathbf{z}) d\mathbf{z} = \frac{4n'_z n_z}{\pi} \frac{[(-1)^{n'_z + n_z} - 1]}{(n'_z{}^2 - n_z^2)^2} \Bigg|_{n'_z \neq n_z} . \quad (3.108)$$

Assim, pode-se escrever o elemento de matriz de \bar{H}_{xz} como

$$\langle n', n'_z | \delta \bar{H}_{xz} | n_z, n \rangle = -2 W_p^{3/4} \sin(\theta) \sqrt{\cos(\theta)} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n', n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n', n+1} \right] \times \frac{4n'_z n_z}{\pi} \frac{[(-1)^{n'_z+n_z} - 1]}{(n'_z{}^2 - n_z{}^2)^2} \Big|_{n'_z \neq n_z} \quad (3.109)$$

A atuação de $\delta \bar{H}_{xz}$ se dá por elementos de matriz não diagonais, os quais acoplam níveis de Landau n e n' subsequentes (deltas de Kronecker em (3.109)) e pertencentes a sub-bandas n_z de diferentes paridades, as quais são acopladas por z .

A partir das equações (3.90), (3.98), (3.100) e (3.109) os elementos de matriz do Hamiltoniano $\bar{H}_0 = \frac{H_0}{Ry^*}$, expandido na base $\{|n_z, n\rangle\}$, foram calculados e a matriz diagonalizada, gerando os autovalores adimensionais λ_i . O cálculo foi realizado para $n_z = 1, 2, 3, 4$ e $n = 0, 1, 2, \dots, 10$, e para os ângulos $\theta = 0^\circ, 35^\circ, 70^\circ$ e 90° . Os resultados são apresentados na Figura 3.6.

Para compreender melhor os efeitos de campo inclinado escolheu-se plotar também os casos $\theta = 0^\circ$ e $\theta = 90^\circ$ apresentados nas seções anteriores. Nas Figuras 3.6a, 3.6c, 3.6e e 3.6g estão representados os autovalores λ_i do Hamiltoniano \bar{H}_0 plotados em função da variável W_p (equação (3.97)), a qual engloba tanto os efeitos do campo magnético B como da largura L do poço quântico. Esta flexibilidade de W_p permite a fixação de uma grandeza, no caso a largura do poço quântico, e a variação da outra grandeza, a intensidade do campo magnético, como mostram os gráficos em 3.6b, 3.6d, 3.6f e 3.6h. Os ramos de energia, que variam em função de B para um poço de largura $L = 18$ nm, foram determinados pela multiplicação dos autovalores λ_i pela constante de Rydberg efetiva $Ry^* = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2}$, que para um poço de 18 nanômetros de largura, considerando a massa efetiva na banda de condução do GaAs ($m^* = 0.067 m_0$, onde m_0 é a massa do elétron no vácuo), é de aproximadamente 17.34 meV.

Observa-se que em $W_p = 0$, para todos os ângulos considerados, os autovalores λ_i são representados por apenas quatro valores, dados por n_z^2 . Os níveis de Landau estão degenerados neste ponto, e esta degenerescência é quebrada com o aumento de W_p (ou com o aumento de B como mostram os gráficos do lado direito da Figura 3.6). Cada ramo de λ_i (lado esquerdo) ou de energia (lado direito) dentro de uma mesma sub-banda n_z está

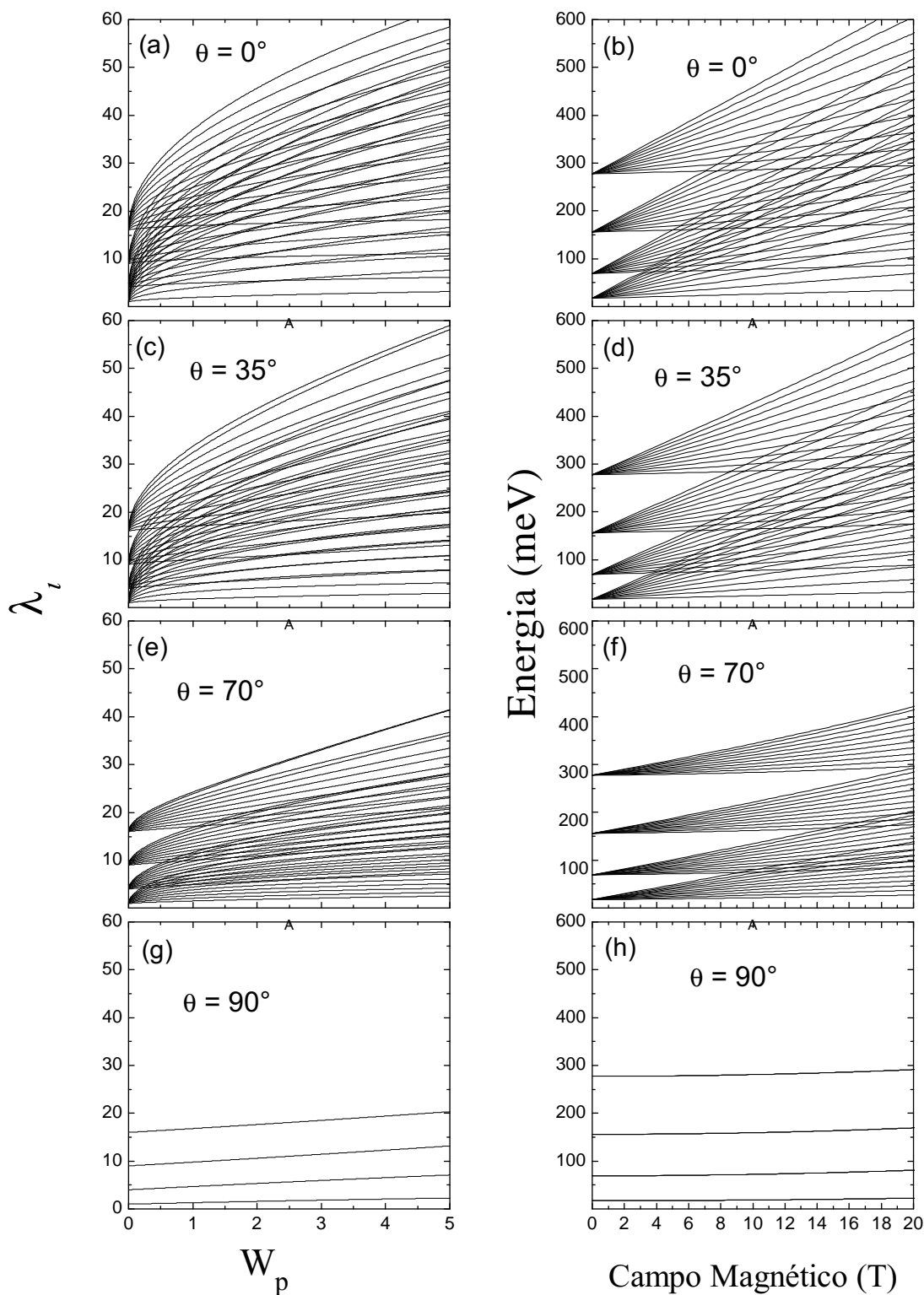


FIGURA 3.6: Na coluna da esquerda são apresentados os autovalores adimensionais λ_i plotados em função da variável W_p (definida na equação (3.97)). A direita estão apresentados os ramos de energia (obtidos pelo produto de λ_i pela constante de Rydberg efetiva $Ry^* \approx 17.34$ meV) em função da intensidade B do campo magnético aplicado, para um poço de largura $L = 18$ nm.

associado a um nível de Landau $\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \cos(\theta)$ ¹. Esta dependência com $\cos(\theta)$ gera a aproximação dos subseqüentes níveis de Landau com o aumento do ângulo θ , até que em $\theta = 90^\circ$ o elemento de matriz de \bar{H}_x (equação (3.98)) se anula, e a degenerescência dos níveis de Landau não é quebrada mesmo para $B \neq 0$. Como pode-se notar, mesmo o elemento de matriz de $\delta\bar{H}_{xz}$ (equação (3.109)) se anula em $\theta = 90^\circ$, restando apenas os termos \bar{H}_z e $\delta\bar{H}_z$ de (3.90) e (3.100), de forma idêntica ao que foi apresentado na Seção 3.2.

No caso $\theta = 0^\circ$, mostrado no gráfico em 3.6a, nota-se claramente que os ramos de autovalores tem a forma definida pela variação com $W_p^{1/2}$. Isto ocorre pois apenas os elementos de matriz de \bar{H}_z e \bar{H}_x (equações (3.90) e (3.98)) não se anulam em $\theta = 0^\circ$. Observa-se no gráfico em 3.6b que os ramos de energia variam linearmente com o campo magnético, já que, segundo a equação (3.97), $W_p^{1/2} \propto B$.

O caso $\theta = 35^\circ$ em 3.6c e 3.6d é, de maneira geral, muito semelhante ao caso $\theta = 0^\circ$, já que os elementos de matriz de $\delta\bar{H}_z$ e $\delta\bar{H}_{xz}$, proporcionais a $\sin(\theta)$ (ver equações (3.100) e (3.109)), ainda contribuem fracamente aos níveis de energia do sistema. Observa-se que os dois ramos superiores de λ_i em 3.6c tendem a se afastar dos outros ramos, o mesmo ocorrendo para o caso $\theta = 70^\circ$. Isto ocorre como um efeito do truncamento da base, ou seja, os níveis de Landau superiores ($n = 9$ e 10) não sentem os efeitos de estados com número quântico n superior a 10, efeitos que apareceriam no caso de uma base infinita. Portanto, o comportamento anômalo apresentado por estes níveis não tem origem física, apenas numérica.

A contribuição de $\delta\bar{H}_z$ e $\delta\bar{H}_{xz}$ torna-se mais intensa em $\theta = 70^\circ$, já que $\sin(70^\circ) \approx 0.94$. Observa-se que as curvas de autovalores, além de apresentar o comportamento típico $W_p^{1/2}$ causado pelo elemento de matriz \bar{H}_x , recebem influência considerável de $\delta\bar{H}_z$ e $\delta\bar{H}_{xz}$, proporcionais a W_p e $W_p^{3/2}$, respectivamente. Nota-se, ainda em $\theta = 70^\circ$, um claro estreitamento das sub-bandas n_z , devido ao fator cosseno em \bar{H}_x ($\cos(70^\circ) \approx 0.34$).

3.3.2 Teoria de perturbação

Nesta seção, as auto-energias do sistema, composto por uma heteroestrutura de poço quântico de largura L na presença de um campo magnético \mathbf{B} inclinado em relação à direção

¹É importante lembrar que cada ramo de energia também se divide em dois através do desdobramento de spin, como foi mostrado na Figura 3.2 para $\theta = 0^\circ$, e que a distância entre estes dois níveis é sempre dada por $\Delta\varepsilon_s = g^* \mu_B B$, não importando o ângulo θ entre \mathbf{B} e $\hat{\mathbf{z}}$.

de crescimento $\hat{\mathbf{z}}$ e dado pela equação (3.74), são obtidas através da aplicação de teoria de perturbação. A princípio, será utilizada a perturbação não-degenerada de primeira e segunda ordem, assim como foi feito na Seção 3.2.2 para $\theta = 90^\circ$. Será considerado como caso não-perturbado o caso $\theta = 0^\circ$, cujo Hamiltoniano $H^{(0)}$ é dado pela soma dos termos H_z e H_x de (3.82). Portanto, o sistema é perturbado quando o campo magnético \mathbf{B} passa a formar um ângulo $\theta \neq 0^\circ$ com a direção $\hat{\mathbf{z}}$, fazendo com que os termos δH_z e δH_{xz} sejam levados em conta.

Os autovalores adimensionais λ_i são dados por

$$\lambda_i = \lambda_i^{(0)} + \lambda_i^{(1)} + \lambda_i^{(2)}, \quad (3.110)$$

onde os superíndices 0, 1 e 2 indicam, respectivamente, os autovalores não-perturbados, os termos perturbativos de primeira ordem, e os termos perturbativos de segunda ordem. Os estados não-perturbados $|\psi_i^{(0)}\rangle$ são dados pelos estados da base $\{|\nu\rangle\} = \{|n_z, n\rangle\}$, onde n_z denota os níveis discretos em um poço quântico infinito e unidimensional, e n representa os níveis de Landau ².

Os termos não-perturbados $\lambda_i^{(0)}$ são obtidos pela aplicação de $\bar{H}^{(0)}$ sobre os estados $|n_z, n\rangle$:

$$\bar{H}^{(0)} |n_z, n\rangle = \lambda_i^{(0)} |n_z, n\rangle, \quad (3.111)$$

onde

$$\bar{H}^{(0)} = \frac{H^{(0)}}{Ry^*} = \bar{H}_z + \bar{H}_x, \quad (3.112a)$$

$$\bar{H}_z = -\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{z}^2} + V(\mathbf{z}), \quad (3.112b)$$

$$\bar{H}_x = \frac{1}{Ry^*} \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*\ell_z^2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + \frac{m^*\omega_z^2\ell_z^2}{2} \mathbf{x}^2 \right), \quad (3.112c)$$

sendo que Ry^* é a constante de Rydberg efetiva dada pela equação (3.29); \mathbf{x} e \mathbf{z} são variáveis adimensionais, dadas respectivamente por $\frac{x}{\ell_z}$ e $\frac{\pi}{L}z$, onde $\ell_z = \sqrt{\frac{\hbar}{eB \cos(\theta)}}$; e $\omega_z = \frac{eB}{m^*} \cos(\theta) = \omega_c \cos(\theta)$ é a frequência ciclotrônica associada à componente z do campo

²Nesta seção, o subíndice i , o qual denota os autoestados $|\psi_i^{(0)}\rangle$ e os autovalores λ_i , está associado ao par de números quânticos n_z e n .

magnético. Substitui-se (3.112a) em (3.111):

$$(\bar{H}_z + \bar{H}_x) |n_z, n\rangle = \lambda_i^{(0)} |n_z, n\rangle . \quad (3.113)$$

O termo \bar{H}_z atua sobre os autoestados $|n_z\rangle$ do poço quântico infinito, gerando os autovalores adimensionais n_z^2 , como descrito na equação (3.90). Já o termo \bar{H}_x , atuando sobre os autoestados $|n\rangle$, gera as energias associadas aos níveis de Landau em (3.17), multiplicadas por $\cos(\theta)$ e divididas por Ry^* :

$$\bar{H}_x |n\rangle = \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \left(n + \frac{1}{2} \right) \cos(\theta) |n\rangle . \quad (3.114)$$

Por meio da equação (3.97), pode-se reescrever (3.114) em termos da variável global W_p :

$$\bar{H}_x |n\rangle = 2\sqrt{W_p} \left(n + \frac{1}{2} \right) \cos(\theta) |n\rangle . \quad (3.115)$$

Assim, os autovalores não-perturbados são dados por

$$\lambda_i^{(0)} = n_z^2 + 2\sqrt{W_p} \left(n + \frac{1}{2} \right) \cos(\theta) . \quad (3.116)$$

Apesar dos autovalores $\lambda_i^{(0)}$ em (3.116) serem denominados "não-perturbados", há a presença do fator cosseno, igual a 1 no caso $\theta = 0^\circ$, mas que apresenta influência em ângulos maiores que zero. Pode-se justificar o termo "não-perturbativo" de \bar{H}_z (3.112b) e \bar{H}_x (3.112c) pelo fato dos termos δH_z e δH_{xz} (equações (3.82d) e (3.82e)) aparecerem apenas em ângulos maiores que zero, sendo, por isso, tratados como exclusivamente perturbativos.

Os termos perturbativos de primeira ordem são dados pela seguinte relação:

$$\lambda_i^{(1)} = \langle n, n_z | \delta \bar{H}_z | n_z, n \rangle + \langle n, n_z | \delta \bar{H}_{xz} | n_z, n \rangle , \quad (3.117)$$

onde $\delta \bar{H}_z$, a partir da equação (3.100), é dado por

$$\delta \bar{H}_z = W_p \sin^2(\theta) \mathbf{z}^2 , \quad (3.118)$$

e $\delta\bar{H}_{xz}$ é dado pela equação (3.103):

$$\delta\bar{H}_{xz} = -2 \sin(\theta) \sqrt{\cos(\theta)} (W_p)^{3/4} \mathbf{x} \cdot \mathbf{z} . \quad (3.119)$$

Substituindo (3.119) no segundo termo do lado direito de (3.117), se obtém:

$$\langle n, n_z | \delta\bar{H}_{xz} | n_z, n \rangle = -2 W_p^{3/4} \sin(\theta) \sqrt{\cos(\theta)} \langle n | \mathbf{x} | n \rangle \langle n_z | \mathbf{z} | n_z \rangle . \quad (3.120)$$

A partir das equações (3.107) e (3.108), sabe-se que os elementos de matriz $\langle n | \mathbf{x} | n \rangle$ e $\langle n_z | \mathbf{z} | n_z \rangle$ se anulam. Portanto, o termo $\delta\bar{H}_{xz}$ não contribui com a perturbação de primeira ordem para a energia.

Ao substituir (3.118) no primeiro elemento do lado de direito de (3.117), o mesmo pode ser escrito como

$$\lambda_i^{(1)} = W_p \sin^2(\theta) \langle n_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle , \quad (3.121)$$

onde

$$\langle n_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \phi_{n_z}(\mathbf{z}) \mathbf{z}^2 \phi_{n_z}(\mathbf{z}) d\mathbf{z} = \frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2n_z^2} ; \quad (3.122a)$$

$$\phi_{n_z}(\mathbf{z}) = \langle \mathbf{z} | n_z \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left(n_z \mathbf{z} + n_z \frac{\pi}{2} \right) . \quad (3.122b)$$

Assim, o termo perturbativo de primeira ordem é dado por

$$\lambda_i^{(1)} = W_p \sin^2(\theta) \left(\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2n_z^2} \right) . \quad (3.123)$$

O termo perturbativo de segunda ordem é determinado a partir da seguinte relação:

$$\lambda_i^{(2)} = \sum_{\substack{n'_z \neq n_z \\ n' \neq n}} \left[\frac{|\langle n', n'_z | \delta\bar{H}_z | n_z, n \rangle|^2}{\lambda_i^{(0)} - \lambda_{i'}^{(0)}} + \frac{|\langle n', n'_z | \delta\bar{H}_{xz} | n_z, n \rangle|^2}{\lambda_i^{(0)} - \lambda_{i'}^{(0)}} \right] . \quad (3.124)$$

O elemento de matriz de $\delta\bar{H}_z$ em (3.124) resulta em

$$\langle n', n'_z | \delta\bar{H}_z | n_z, n \rangle = W_p \sin^2(\theta) \delta_{n', n} \langle n'_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle , \quad (3.125)$$

onde o elemento de matriz de \mathbf{z}^2 é dado pela equação (3.101). A presença da delta de

Kronecker $\delta_{n',n}$ em (3.125) vai contra a condição imposta pelo somatório em (3.124): $n' \neq n$. Desta forma, o termo $\delta\bar{H}_z$ não contribui com o termo perturbativo de segunda ordem $\lambda_i^{(2)}$.

O elemento de matriz de $\delta\bar{H}_{xz}$ em (3.124) é dado pela equação (3.109):

$$\begin{aligned} \langle n', n'_z | \delta\bar{H}_{xz} | n_z, n \rangle = & -2 W_p^{3/4} \sin(\theta) \sqrt{\cos(\theta)} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n',n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n',n+1} \right] \\ & \times \frac{4n'_z n_z [(-1)^{n'_z+n_z} - 1]}{\pi (n'_z{}^2 - n_z^2)^2} \Bigg|_{n'_z \neq n_z}. \end{aligned} \quad (3.126)$$

Substituindo (3.126) em (3.124), e considerando que $\lambda_i^{(0)}$ é dado pela equação (3.116), se obtém

$$\begin{aligned} \lambda_i^{(2)} = & \frac{32}{\pi^2} n_z^2 W_p^{3/2} \sin^2(\theta) \cos(\theta) \\ & \times \sum_{\substack{n'_z \neq n_z \\ n' \neq n}} \frac{n'_z{}^2 [(-1)^{n'_z+n_z} - 1]^2}{(n_z^2 - n'_z{}^2)^4} \frac{(\sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1})^2}{n_z^2 + 2\sqrt{W_p} (n + \frac{1}{2}) \cos(\theta) - n'_z{}^2 - 2\sqrt{W_p} (n' + \frac{1}{2}) \cos(\theta)}. \end{aligned} \quad (3.127)$$

As deltas de Kronecker em (3.127) reduzem o somatório em n' a apenas dois termos. Assim, os termos perturbativos de segunda ordem são dados como segue:

$$\begin{aligned} \lambda_i^{(2)} = & \frac{32}{\pi^2} n_z^2 W_p^{3/2} \sin^2(\theta) \cos(\theta) \sum_{n'_z \neq n_z} \frac{n'_z{}^2 [(-1)^{n'_z+n_z} - 1]^2}{(n_z^2 - n'_z{}^2)^4} \\ & \times \left[\frac{n+1}{n_z^2 + 2\sqrt{W_p} (n + \frac{1}{2}) \cos(\theta) - n'_z{}^2 - 2\sqrt{W_p} (n+1 + \frac{1}{2}) \cos(\theta)} \right. \\ & \left. + \frac{n}{n_z^2 + 2\sqrt{W_p} (n + \frac{1}{2}) \cos(\theta) - n'_z{}^2 - 2\sqrt{W_p} (n-1 + \frac{1}{2}) \cos(\theta)} \right]. \end{aligned} \quad (3.128)$$

ou

$$\lambda_i^{(2)} = \frac{32}{\pi^2} n_z^2 W_p^{3/2} \sin^2(\theta) \cos(\theta) \sum_{n'_z \neq n_z} \left[\frac{n+1}{n_z^2 - n'_z{}^2 - 2\sqrt{W_p} \cos(\theta)} + \frac{n}{n_z^2 - n'_z{}^2 + 2\sqrt{W_p} \cos(\theta)} \right] \times \frac{n'_z{}^2 [(-1)^{n'_z+n_z} - 1]^2}{(n_z^2 - n'_z{}^2)^4}. \quad (3.129)$$

Substituindo (3.116), (3.123) e (3.129) em (3.110) se obtém a seguinte relação para os autovalores adimensionais λ_i :

$$\lambda_i = n_z^2 + 2 W_p^{1/2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \cos(\theta) + C_{n_z} W_p \sin^2(\theta) + F_{n_z, n} n_z^2 W_p^{3/2} \sin^2(\theta) \cos(\theta), \quad (3.130a)$$

onde

$$C_{n_z} = \frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2n_z^2}; \quad (3.130b)$$

$$F_{n_z, n} = \frac{32}{\pi^2} \sum_{n'_z \neq n_z} \left[\frac{n+1}{n_z^2 - n'^2_z - 2\sqrt{W_p} \cos(\theta)} + \frac{n}{n_z^2 - n'^2_z + 2\sqrt{W_p} \cos(\theta)} \right] \times \frac{n'^2_z [(-1)^{n'_z+n_z} - 1]^2}{(n_z^2 - n'^2_z)^4}. \quad (3.130c)$$

A Figura 3.7 apresenta os autovalores adimensionais λ_i calculados a partir da equação (3.130) e plotados em relação a W_p . Assim como na seção anterior, também foram plotados curvas de energia (obtidas do produto de λ_i pela constante de Rydberg efetiva $Ry^* = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} \approx 17.34$ meV, valor correspondente a um poço quântico de GaAs de largura $L = 18$ nm) em relação à intensidade B do campo magnético aplicado. Os gráficos de autovalores λ_i por W_p são apresentados do lado esquerdo da Figura 3.7, enquanto que na coluna a direita são apresentados os gráficos dos níveis de energia plotados em relação à B . Foram plotadas quatro sub-bandas n_z as quais são constituídas por 11 níveis de Landau ($n = 0, 1, 2, \dots, 10$).

O caso não-perturbado $\theta = 0^\circ$ é apresentado nas Figuras 3.7a e 3.7b. Os autovalores λ_i são dados apenas por $\lambda_i^{(0)}$ em (3.116). Observa-se em 3.7a que, em $W_p = 0$, os autovalores são dados por n_z^2 , e com o aumento de W_p nota-se claramente a dependência com $W_p^{1/2}$, a qual se converte em uma dependência linear dos ramos de energia em relação a B (ver equação (3.97)), como se observa em 3.7b.

Os casos de campo inclinado, como na seção anterior, estão representados pelos ângulos $\theta = 35^\circ$ e $\theta = 70^\circ$. Observa-se que as curvas de λ_i foram plotadas para W_p até 3, valor equivalente a um poço de largura $L \approx 23.7$ nanômetros na presença de um campo de intensidade 20 T. Na seção anterior, onde os autovalores em um campo inclinado foram calculados pela diagonalização de \bar{H}_0 expandido na base $\{|n_z, n\rangle\}$, o valor máximo plotado para W_p era igual a 5, correspondente a $B = 20$ T e $L \approx 27$ nm. Observa-se no caso $\theta = 90^\circ$,

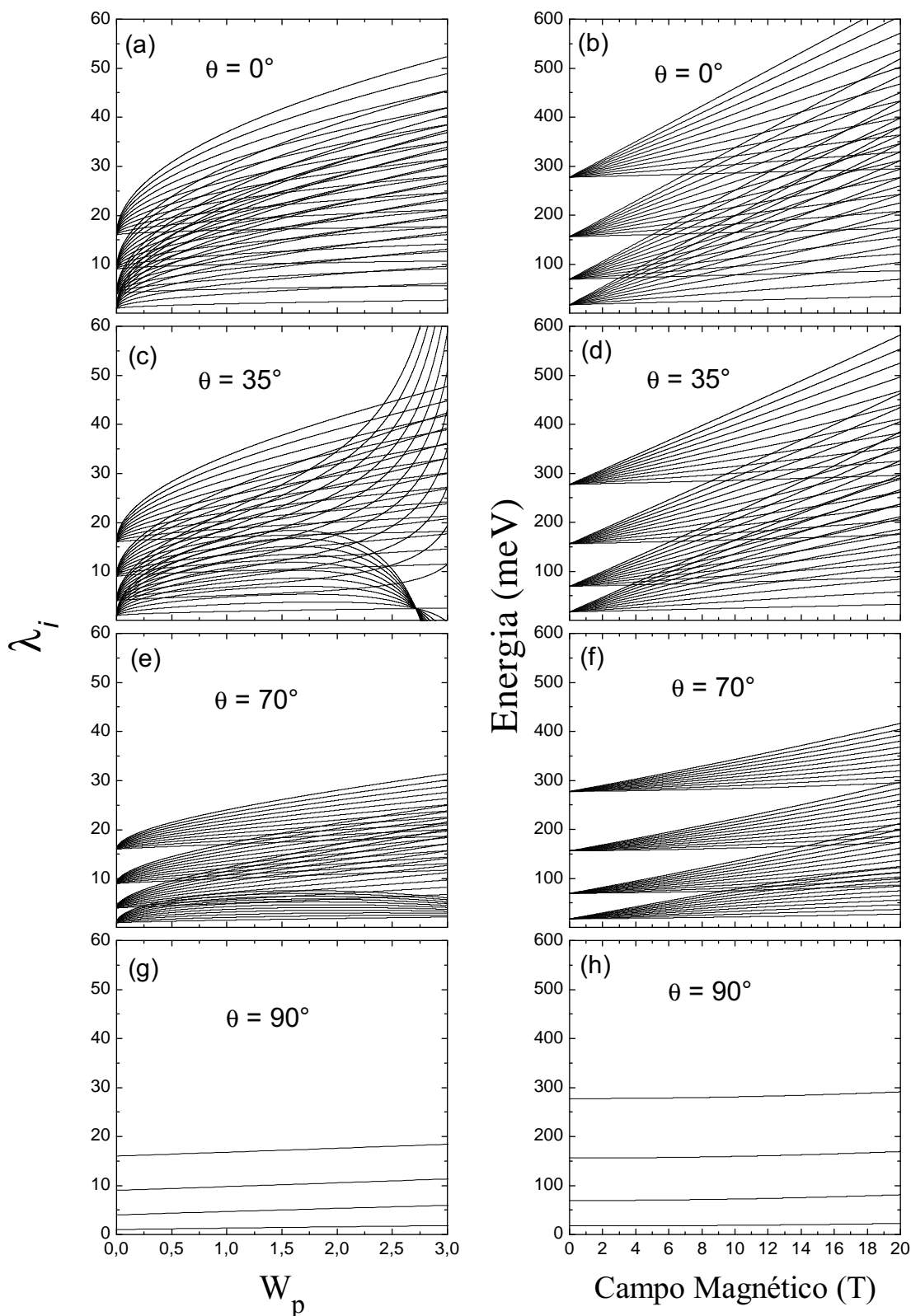


FIGURA 3.7: Na coluna da esquerda são apresentados os autovalores adimensionais λ_i calculados por teoria de perturbação não-degenerada de primeira e segunda ordem e plotados em função da variável W_p . A direita estão apresentados os ramos de energia (obtidos pelo produto de λ_i pela constante de Rydberg efetiva $Ry^* \approx 17.34$ meV) em função da intensidade B do campo magnético aplicado, para um poço de largura $L = 18$ nm.

apresentado na Figura 3.4, que os ramos de autovalores calculados por teoria de perturbação são bem comportados, quase coincidindo com os ramos calculados por diagonalização (Seção 3.2.1) e pelo método analítico (Seção 3.2.3). No entanto, no caso de campo inclinado, a teoria de perturbação apresenta alguns pontos de divergência. Observa-se, na Figura 3.7c para $\theta = 35^\circ$, que os ramos de λ_i das sub-bandas $n_z = 1$ e $n_z = 2$ começam a se comportar de maneira muito diferente em relação às sub-bandas $n_z = 3$ e $n_z = 4$. Para $W_p \approx 1.5$, os ramos em $n_z = 1$ e $n_z = 2$ deixam de apresentar uma dependência típica de $W_p^{1/2}$, sinalizando um caso de divergência. Isto é claramente representado na Figura 3.8a, onde o gráfico dos autovalores em 3.7c é plotado para W_p até 5. Nota-se que em $W_p \approx 3.35$, λ_i diverge para valores da ordem de grandeza de 10^4 . Para o caso $\theta = 70^\circ$ no gráfico da Figura 3.7e já se observa, para a sub-banda $n_z = 1$, um comportamento peculiar, o que é confirmado no gráfico (b) da Figura 3.8, onde as sub-bandas $n_z = 1$ e $n_z = 2$ apresentam comportamento divergente, muito semelhante ao gráfico da Figura 3.7c.

A explicação para a divergência de λ_i em relação a W_p se encontra no termo perturbativo de segunda ordem. Nota-se, na equação (3.129) e no termo $F_{n_z, n}$ em (3.130c), a presença do seguinte fator:

$$\frac{n+1}{n_z^2 - n_z'^2 - 2\sqrt{W_p} \cos(\theta)} + \frac{n}{n_z^2 - n_z'^2 + 2\sqrt{W_p} \cos(\theta)}.$$

Para certos valores de n_z , n_z' e W_p , e para certos ângulos θ o denominador de um ou outro termo do fator acima pode zerar, fazendo com que o termo $\lambda_i^{(2)}$, e conseqüentemente λ_i , atinjam valores muito elevados, como mostrado no gráfico da Figura 3.8a. Para $n_z = 1$, $n_z' = 2$ e $\theta = 35^\circ$, a divergência ocorre em $W_p \approx 3.35$, como mostra a Figura 3.8a. Para o ângulo de inclinação do campo magnético igual a 70° , estas mesmas sub-bandas divergem em $W_p \approx 19.23$. Devido a presença do fator $\cos(\theta)$ no termo de segunda ordem em (3.129) esta divergência não é observada no caso $\theta = 90^\circ$ apresentado na Figura 3.4 e nas Figuras 3.7a e 3.7b³. Além disso, obviamente, o caso não-perturbado $\theta = 0^\circ$ também se comporta de maneira estável em relação a W_p , já que os termos perturbativos de primeira e segunda ordem (equações (3.123) e (3.129)) se anulam no caso em questão.

³Os resultados apresentados para $\theta = 90^\circ$ na Figura 3.7 foram obtidos pelo método de teoria de perturbação apresentado na Seção 3.2.2, e calculados por meio da equação (3.52).

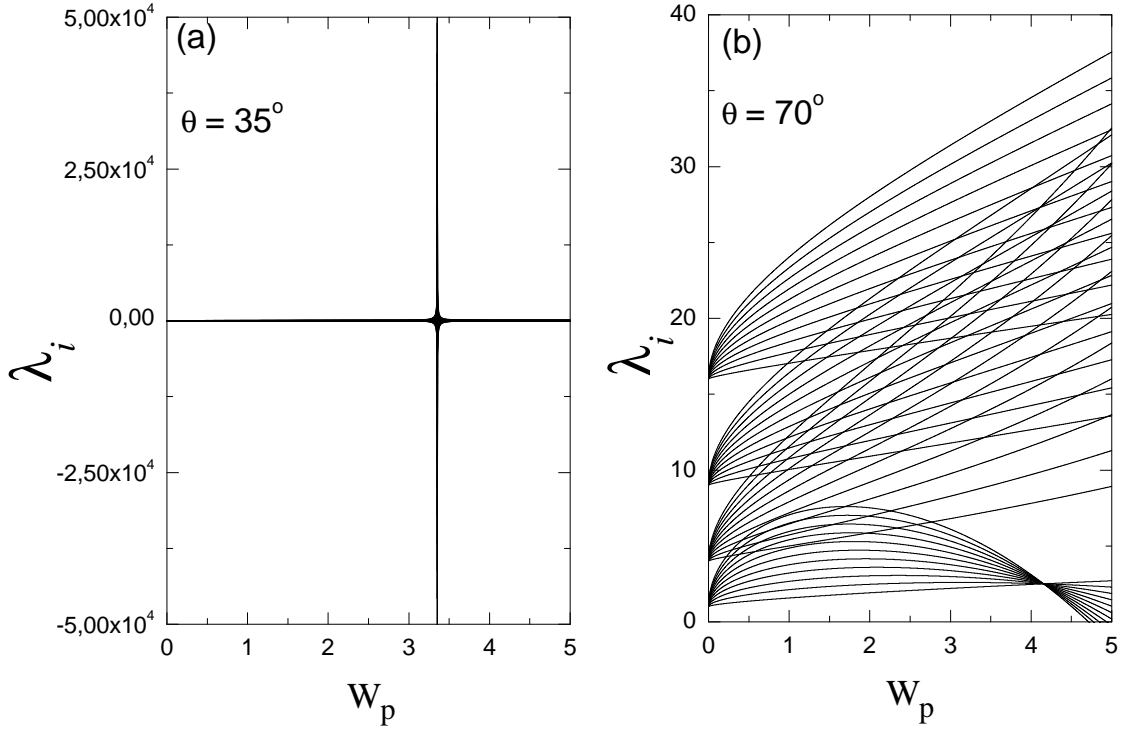


FIGURA 3.8: autovalores λ_i calculados por teoria de perturbação não-degenerada para campos magnéticos inclinados em ângulos θ iguais a 35° (a) e 70° (b) em relação à direção de crescimento do poço quântico (direção \hat{z}), e plotados em relação à variável W_p (ver equação (3.97)). Observa-se, em (a), que para certos valores de W_p os autovalores λ_i "explodem", atingindo valores da ordem de 10^4 . Já em (b), para o caso $\theta = 70^\circ$, é possível notar uma pequena divergência para os autovalores da sub-banda $n_z = 2$, similar ao caso $\theta = 35^\circ$ da Figura 3.7c.

As divergências apresentadas nos casos de campo inclinado evidenciam a não aplicabilidade da teoria de perturbação não-degenerada em determinados casos. Para entender melhor, considera-se o exemplo dos estados não-perturbados $|n_z, n\rangle = |1, 1\rangle$ e $|2, 0\rangle$, para o ângulo de inclinação $\theta = 35^\circ$. Se fossem plotados em função de W_p apenas os ramos de autovalores não-perturbados $\lambda_i^{(0)}$, dados pela equação (3.116), se observaria que, em $W_p \approx 3.35$, os ramos de energia associados aos estados $|1, 1\rangle$ e $|2, 0\rangle$ se cruzam, ou seja, para este valor crítico $W_p^{(c)}$, os estados $|1, 1\rangle$ e $|2, 0\rangle$ são degenerados. Ocorre que, por meio do termo δH_{xz} (equação (3.103)), os estados $|1, 1\rangle$ e $|2, 0\rangle$ se acoplam, o que significa dizer que o elemento de matriz (3.126) não se anula para estes dois estados. Portanto, a presença do elemento de matriz de $\delta \bar{H}_{xz}$ no termo perturbativo de segunda ordem (3.124) faz com que a teoria de perturbação não-degenerada seja imprópria para descrever os estados $|1, 1\rangle$ e $|2, 0\rangle$ no ponto

de degenerescência $W_p^{(c)}$, o que resulta na divergência mostrada nas Figuras 3.7c e 3.8a.

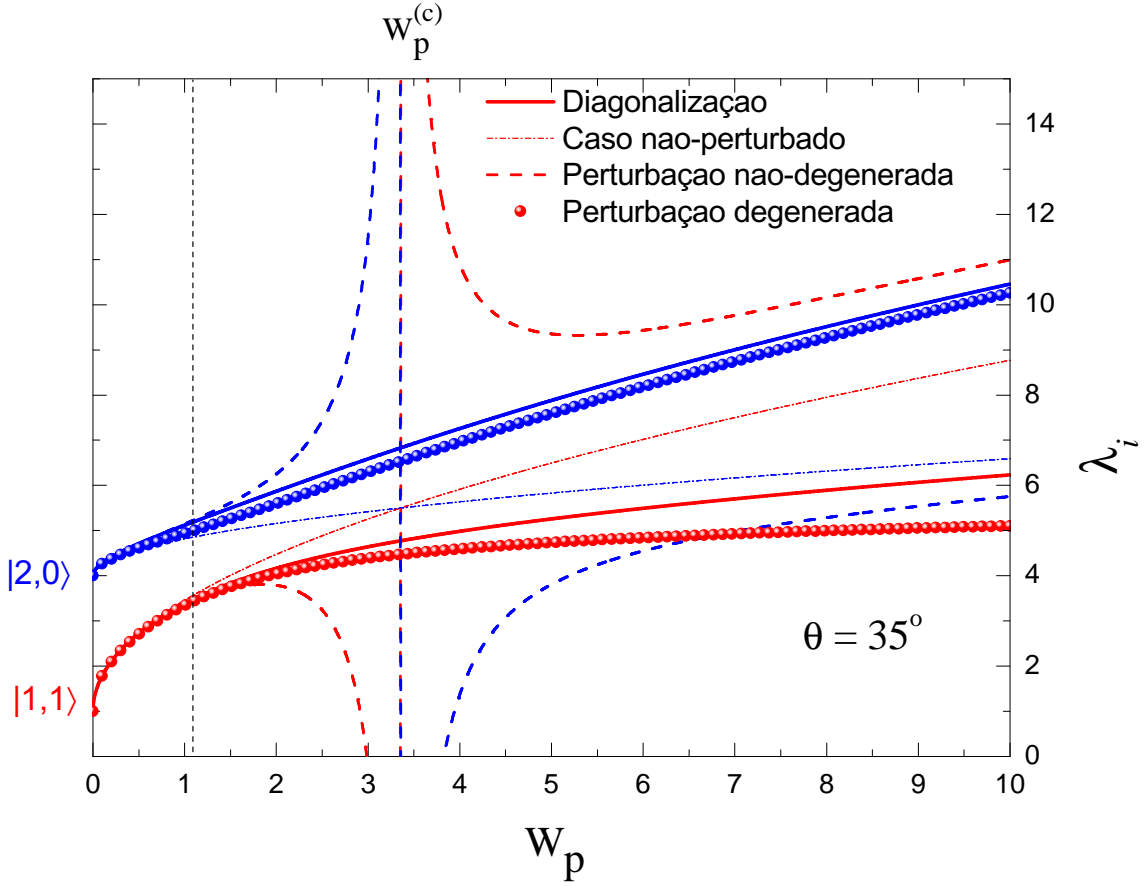


FIGURA 3.9: Curvas de autovalores associados aos estados $|n_z, n\rangle = |1, 1\rangle$ (em vermelho) e $|2, 0\rangle$ (em azul) em função da variável W_p , obtidas por diversos métodos, para um campo magnético inclinado 35° em relação a \hat{z} . Nota-se que as curvas tracejadas mais finas, que representam a solução não-perturbada $\lambda_i^{(0)}$ (equação (3.116)), se cruzam no ponto crítico $W_p^{(c)} \approx 3.35$, no que ocorre a divergência dos resultados da teoria de perturbação não-degenerada (linhas tracejadas grossas). A aplicação de teoria de perturbação degenerada (símbolos) levanta a degenerescência em $W_p^{(c)}$, e gera resultados próximos dos obtidos pela diagonalização do Hamiltoniano orbital H_0 (equação (3.82)) na base $\{|n_z, n\rangle\}$.

Deve-se, portanto, aplicar a teoria de perturbação degenerada em todos os pontos de cruzamento entre ramos $\lambda_i^{(0)}$ associados a estados não-perturbados $|n_z, n\rangle$ e $|n'_z, n'\rangle$ que se acoplam por meio de potenciais perturbativos, tais como os termos δH_z e δH_{xz} dados pelas equações (3.118) e (3.119). Para exemplificar a divergência observada para as sub-bandas $n_z = 1$ e $n_z = 2$, ainda serão utilizados os estados $|1, 1\rangle$ e $|2, 0\rangle$. Os mesmos se acoplam, como dito acima, por meio do termo perturbativo δH_{xz} . Assim, a degenerescência dos estados $|1, 1\rangle$ e $|2, 0\rangle$ no ponto crítico $W_p^{(c)}$ é levantada através da ação do termo perturbativo δH_{xz} . Os

autovalores λ para este sistema de dois estados degenerados são obtidos a partir da resolução do seguinte determinante:

$$\begin{vmatrix} \lambda_{1,1}^{(0)} - \lambda & \langle 0, 2 | \delta \bar{H}_{xz} | 1, 1 \rangle \\ \langle 1, 1 | \delta \bar{H}_{xz} | 2, 0 \rangle & \lambda_{2,0}^{(0)} - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (3.131)$$

de onde se obtém a expressão:

$$\lambda_{\pm} = \frac{\lambda_{1,1}^{(0)} + \lambda_{2,0}^{(0)}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda_{1,1}^{(0)} + \lambda_{2,0}^{(0)}}{2}\right)^2 + |\langle 0, 2 | \delta \bar{H}_{xz} | 1, 1 \rangle|^2}, \quad (3.132)$$

onde $\lambda_{1,1}^{(0)}$ e $\lambda_{2,0}^{(0)}$ são os autovalores não-perturbados associados aos estados $|1, 1\rangle$ e $|2, 0\rangle$, respectivamente.

O gráfico da Figura 3.9 apresenta uma comparação dos autovalores associados aos dois estados em questão, obtidos para $\theta = 35^\circ$ por meio de diferentes métodos. As curvas tracejadas mais finas representam os autovalores não-perturbados $\lambda_i^{(0)}$. Observa-se um cruzamento no ponto crítico $W_p^{(c)} \approx 3.35$, justamente o ponto de divergência das curvas obtidas por teoria de perturbação não-degenerada, representadas por linhas tracejadas mais grossas. Os símbolos representam os autovalores obtidos por teoria de perturbação degenerada, a partir da equação (3.132). Observa-se o levantamento da degenerescência em torno de $W_p^{(c)}$, e uma razoável concordância com o resultado da diagonalização de H_0 (equação (3.82)) na base $\{|n_z, n\rangle\}$, discutida na Seção 3.3.1. É possível perceber na Figura 3.9 que, até W_p pouco maior que 1, há uma ótima concordância entre os resultados de diagonalização e de teoria de perturbação não-degenerada. A partir deste valor, os ramos obtidos pelo segundo método passam a divergir intensamente, até o ponto crítico $W_p^{(c)}$. Portanto, para esta região deve-se utilizar a abordagem por teoria de perturbação degenerada, o mesmo sendo válido para outros pares de estados acoplados e degenerados em $W_p^{(c)} \approx 3.35$, como $|1, 2\rangle$ e $|2, 1\rangle$, $|1, 3\rangle$ e $|2, 2\rangle$, etc.

A fim de comparar os resultados obtidos por teoria de perturbação não-degenerada e os resultados obtidos pela expansão e diagonalização do Hamiltoniano H_0 de (3.82) na base $\{|n_z, n\rangle\}$, foi plotado o gráfico da Figura 3.10. Estão representados o primeiro e o último nível de energia apresentados no lado direito das Figuras 3.6 e 3.7, para um poço de largura $L = 18$ nm, na presença de um campo magnético \mathbf{B} inclinado 0° , 35° , 70° e 90° em relação à

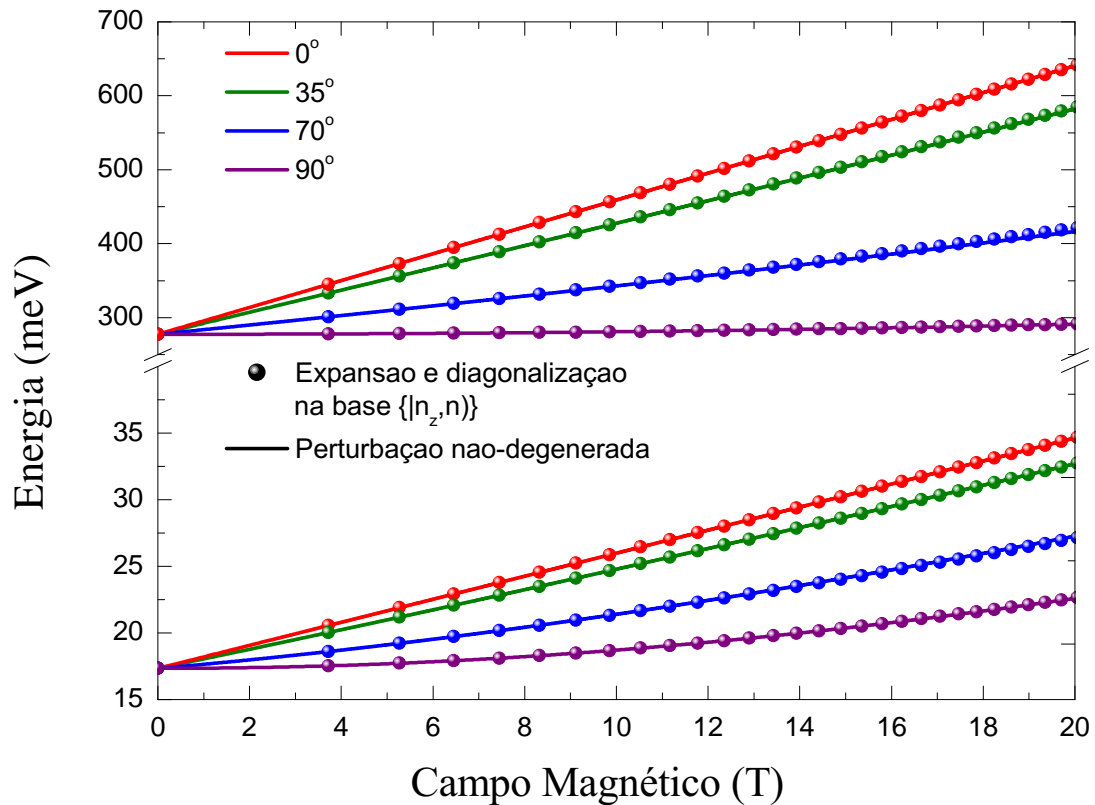


FIGURA 3.10: Primeiro e último nível de energia representado nas Figuras 3.6 e 3.7, calculados por diagonalização numérica e teoria de perturbação não-degenerada, em um poço quântico infinito de largura $L = 18$ nm, na presença de campos magnéticos \mathbf{B} de intensidade entre 0 e 20 T e que forma com a direção de confinamento \hat{z} os ângulos $\theta = 0^\circ, 35^\circ, 70^\circ$ e 90° .

direção de confinamento \hat{z} do poço. Este valor de L , juntamente com a intensidade máxima plotada para o campo magnético, igual a 20 T, correspondem a um valor máximo igual a 1 para W_p . Dentro deste limite, se observa uma boa concordância entre os resultados obtidos por diagonalização e por teoria de perturbação não-degenerada, como já foi observado na Figura 3.9 a esquerda da linha tracejada. Isto significa que, dentro de um limite alto de valores L e B , a teoria de perturbação não-degenerada representa uma ferramenta útil no cálculo da estrutura eletrônica no poço da banda de condução na presença de um campo magnético inclinado, e não são observadas as divergências representadas nas Figuras 3.7c, 3.7e, 3.8 e 3.9. Além disso, a base $\{|n_z, n\rangle\}$ que soluciona o caso $\theta = 0^\circ$ (Seção 3.1) se mostrou aplicável ao caso $\theta = 90^\circ$ (Seção 3.2), e uma ferramenta equivalente à solução

analítica apresentada na Seção 3.2.3. Assim, no próximo capítulo, dedicado ao cálculo dos estados da banda de valência em uma heteroestrutura de poço quântico na presença de um campo magnético \mathbf{B} , será utilizada a aproximação de função envelope juntamente com o método de expansão e diagonalização do Hamiltoniano do sistema na base $\{|\nu\rangle\}$.

4. Cálculo da banda de valência

O foco do presente capítulo se encontra na determinação dos níveis de energia da banda de valência no interior de uma heteroestrutura de poço quântico (modelada pelo potencial infinito $V(z)$ da equação (3.2)), na presença de um campo magnético \mathbf{B} externo. Serão considerados os casos em que \mathbf{B} aponta sobre a direção de crescimento $\hat{\mathbf{z}}$ e o caso inclinado, em que \mathbf{B} forma com $\hat{\mathbf{z}}$ um ângulo θ , tal que $0^\circ < \theta < 90^\circ$. Antes de tratar destes casos específicos, serão expostos alguns conceitos básicos envolvendo o modelo de Kane, e a obtenção do Hamiltoniano de Luttinger.

No Capítulo 2 foi mostrado que estados de Bloch $|\nu, \mathbf{k}\rangle$ são utilizados para o expandir o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ em (2.11), a fim de se determinar as equações de dispersão de $E_\nu(\mathbf{k})$. Há uma dificuldade em determinar a forma dos estados $|\nu, \mathbf{k}\rangle$; no entanto, em pontos de alta simetria como o ponto Γ da 1ª zona de Brillouin, pode-se empregar operações de simetria sobre as funções de Bloch, utilizando conceitos de teoria de grupo [12]. Desta forma, os estados $|\nu, \mathbf{0}\rangle$ mais ao topo da banda de valência e no mínimo da banda de condução são dados pelos estados $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ e $|S\rangle$. Os estados $|\mu, \mathbf{k}\rangle$, os quais são combinações lineares dos estados $|\nu, \mathbf{0}\rangle$ vezes os autoestados de spin $|\sigma\rangle$ de σ_z (equação (2.12)), formam, em $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, o seguinte conjunto de oito estados: $|S, \uparrow\rangle, |X, \uparrow\rangle, |Y, \uparrow\rangle, |Z, \uparrow\rangle, |S, \downarrow\rangle, |X, \downarrow\rangle, |Y, \downarrow\rangle$ e $|Z, \downarrow\rangle$, onde

$$|\uparrow\rangle \equiv |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle \equiv |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

Em compostos semicondutores do grupo III-V, tais como o arseneto de gálio, não se pode zerar o acoplamento spin-órbita, como foi comentado no Capítulo 2. Assim, Kane elaborou uma base em que o termo de spin-órbita fosse diagonal em $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Os estados desta base são formados por combinações lineares dos 8 estados de Bloch citados acima. Ocorre que o momento angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ e a sua componente J_z são também diagonais nesta nova base. Portanto, pode-se escrever os autoestados $|J, m_J\rangle$ de \mathbf{J} e J_z como uma combinação linear dos estados $|S, \uparrow\rangle, |X, \uparrow\rangle, |Y, \uparrow\rangle, |Z, \uparrow\rangle, |S, \downarrow\rangle, |X, \downarrow\rangle, |Y, \downarrow\rangle$ e $|Z, \downarrow\rangle$. O caso $\ell = |\mathbf{L}| = 0$ e $S = |\mathbf{S}| = 1/2$ implica apenas em $J = 1/2$ (banda de condução, de simetria Γ_6). Já na banda de valência, onde $\ell = 1$, se obtém um quadrupeto $J = 3/2$ (simetria Γ_8 , os estados de buraco leve e pesado) e um dubleto $J = 1/2$ (simetria Γ_7 , os

estados *split-off* de spin-órbita), cuja separação é dada por um valor Δ de energia (equação (2.15c)). Uma representação das bandas de condução e de valência em torno do *gap* e de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ é dada pela Figura 4.1. Já os estados $|J, m_J\rangle$ escritos em termos dos estados de Bloch, e seus respectivos autovalores em $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ são apresentados na Tabela 4.1 [28].

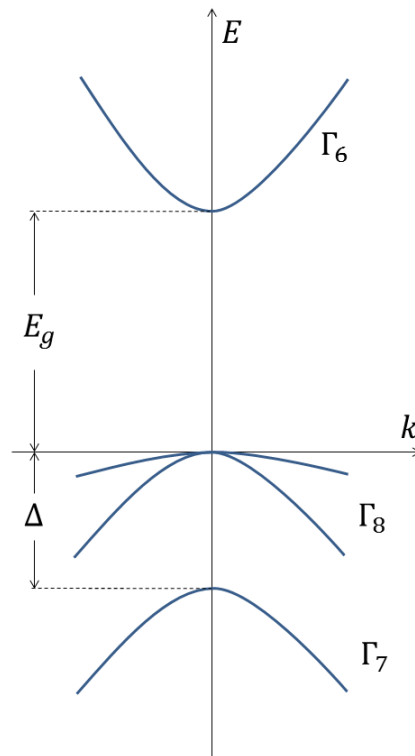


FIGURA 4.1: Representação da estrutura de bandas do GaAs em torno do *gap* entre as bandas de condução e de valência. Observa-se que os estados de HH e LH da banda de valência Γ_8 são degenerados no ponto $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ e estão separados por uma energia Δ em relação aos estados *split-off* de spin-órbita.

Kane expandiu o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de (2.11) na base dos estados $|J, m_J\rangle$, e obteve uma matriz 8×8 . Os autovalores $E_i(\mathbf{k})$ são obtidos através da diagonalização deste Hamiltoniano, e a contribuição das outras bandas é levada em conta por teoria de perturbação [12].

Luttinger [32] reduziu ainda mais o problema, focando nos estados da banda de valência Γ_8 . Para tanto, ele expandiu o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de (2.11) na base formada pelos estados $\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle$, $\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$, $\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$ e $\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle$, utilizando a teoria de perturbação quasi-degenerada

TABELA 4.1: Estados $|J, m_J\rangle$, escritos em termos dos estados de Bloch vezes os autoestados de spin σ_z , no ponto $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ da 1ª zona de Brillouin para a banda de condução Γ_6 e as bandas de valência Γ_8 e Γ_7 . São também apresentados os valores de energia no ponto $\mathbf{0}$, como mostra a Figura 4.1.

Simetria	$ J, m_J\rangle$	$E_i(\mathbf{k} = \mathbf{0})$
Γ_6	$\left \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = S, \uparrow\rangle$	E_g
	$\left \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = S, \downarrow\rangle$	E_g
Γ_8	$\left \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} X + iY, \uparrow\rangle$	0
	$\left \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} X + iY, \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} Z, \uparrow\rangle$	0
	$\left \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} X - iY, \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} Z, \downarrow\rangle$	0
	$\left \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} X - iY, \downarrow\rangle$	0
Γ_7	$\left \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} X + iY, \downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} Z, \uparrow\rangle$	$-\Delta$
	$\left \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} X - iY, \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} Z, \downarrow\rangle$	$-\Delta$

de Löwdin [15, 38], e obteve o seguinte Hamiltoniano 4×4 [41]:

$$H_L = \begin{array}{c} \left\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right| \\ \left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right| \\ \left\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right| \\ \left\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right| \end{array} \begin{array}{c} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \end{array} = \begin{array}{ccccc} D_{HH}^{(+)} & Q & R & 0 \\ Q^\dagger & D_{LH}^{(+)} & 0 & R \\ R^\dagger & 0 & D_{LH}^{(-)} & -Q \\ 0 & R^\dagger & -Q^\dagger & D_{HH}^{(-)} \end{array}, \quad (4.2a)$$

onde

$$D_{HH}^{(\pm)} = -\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) (k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2} \right) k_z^2, \quad (4.2b)$$

$$D_{LH}^{(\pm)} = -\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2} \right) (k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2} \right) k_z^2, \quad (4.2c)$$

$$Q = \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_3 (k_x - ik_y) k_z, \quad (4.2d)$$

$$R = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} [\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) - 2i \gamma_3 k_x k_y], \quad (4.2e)$$

sendo k_x , k_y e k_z as componentes do vetor de onda \mathbf{k} . A massa do elétron livre é denotada por m_0 , e γ_1 , γ_2 e γ_3 são os parâmetros de Luttinger, os quais fornecem os valores de massa efetiva dos buracos pesados (HH) e buracos leves (LH). Os valores destes parâmetros são determinados de acordo com medidas experimentais de massa efetiva na banda de valência e, em geral, $\gamma_1 > \gamma_2 \approx \gamma_3$ [33]. Nota-se, nos termos diagonais de H_L em (4.2b) e (4.2c), que a massa efetiva na banda de valência é anisotrópica, tendo um valor no plano xy e outro em z , diferentemente da aproximação isotrópica utilizada para a banda de condução no Capítulo 3, onde os níveis de energia foram calculados a partir do Hamiltoniano de massa efetiva em (3.1), sendo a massa efetiva dada apenas por m^* .

O Hamiltoniano de Luttinger H_L foi inicialmente elaborado para ser aplicado a materiais semicondutores homogêneos, os chamados materiais *bulk*. No entanto, o interesse deste trabalho se encontra sobre heteroestruturas semicondutoras de poço quântico na presença de um campo magnético \mathbf{B} . Na condição de campos e potenciais externos a aplicação de H_L requer algumas transformações. Na presença de um potencial de confinamento $V(z)$ o vetor de onda \mathbf{k} é substituído por um operador $\hat{\mathbf{k}}$, dado por

$$\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla. \quad (4.3)$$

Além disso, na aplicação de um campo magnético externo \mathbf{B} , o operador $\hat{\mathbf{k}}$ passa a ser descrito segundo a equação (2.24):

$$\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}. \quad (4.4)$$

Enquanto as componentes do vetor de onda são comutáveis entre si, o mesmo não pode ser dito das componentes do operador $\hat{\mathbf{k}}$ [28]. Adicionando o potencial de confinamento $V(z)$ e substituindo o vetor de onda \mathbf{k} pelo operador $\hat{\mathbf{k}}$, os elementos de H_L podem ser escritos

como:

$$D_{HH}^{(\pm)} = -\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) (\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) - \frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2} \right) \hat{k}_z^2 + V(z), \quad (4.5a)$$

$$D_{LH}^{(\pm)} = -\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2} \right) (\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) - \frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2} \right) \hat{k}_z^2 + V(z), \quad (4.5b)$$

$$Q = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_3 (\hat{k}_- \hat{k}_z + \hat{k}_z \hat{k}_-), \quad (4.5c)$$

$$R = -\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) \hat{k}_-^2, \quad (4.5d)$$

onde $\hat{k}_\pm = \hat{k}_x \pm i\hat{k}_y$. Além disso, no termo R em (4.5d) foi utilizada a aproximação axial

$$\gamma_2 \approx \gamma_3 \rightarrow \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right),$$

e foi inserida a simetrização no termo Q em (4.5c) devido à não-comutabilidade dos operadores \hat{k}_- e \hat{k}_z .

A presença de um campo magnético \mathbf{B} também causa efeitos de acoplamento e desdobramento de spin sobre os estados da banda de valência, de maneira semelhante ao que faz o termo $\frac{g^*}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ na banda de condução. Assim, ao Hamiltoniano em (4.2) é somado um Hamiltoniano de interação Zeeman H_Z :

$$H_Z = -2\mu_B \kappa \begin{pmatrix} \frac{3}{2} B_z & \frac{\sqrt{3}}{2} B_- & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} B_+ & \frac{1}{2} B_z & B_- & 0 \\ 0 & B_+ & -\frac{1}{2} B_z & \frac{\sqrt{3}}{2} B_- \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} B_+ & -\frac{3}{2} B_z \end{pmatrix} - 2\mu_B \zeta \begin{pmatrix} \frac{27}{8} B_z & \frac{7\sqrt{3}}{8} B_- & 0 & \frac{3}{4} B_+ \\ \frac{7\sqrt{3}}{8} B_+ & \frac{1}{8} B_z & \frac{5}{2} B_- & 0 \\ 0 & \frac{5}{2} B_+ & -\frac{1}{8} B_z & \frac{7\sqrt{3}}{8} B_- \\ \frac{3}{4} B_- & 0 & \frac{7\sqrt{3}}{8} B_+ & -\frac{27}{8} B_z \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

onde $B_\pm = B_x \pm iB_y$, κ é o fator g do invariante isotrópico, e ζ é o fator g do invariante anisotrópico [28]. Observa-se que, no caso de um campo magnético apontado sobre a direção $\hat{\mathbf{z}}$ (caso $\theta = 0^\circ$), o Hamiltoniano de interação Zeeman H_Z promove apenas a separação de energia entre os estados de buraco pesado ou buraco leve com spins opostos. No entanto, no caso de campo inclinado, em que há uma componente de \mathbf{B} sobre o plano xy , H_Z atua de modo a acoplar diferentes estados da banda de valência, sendo que este acoplamento é proporcional à intensidade do campo magnético aplicado.

Portanto, neste capítulo, serão determinados os níveis de energia dentro de um poço quântico de largura L em z , na presença de um campo magnético \mathbf{B} . Emprega-se, nesta tarefa, o Hamiltoniano de Luttinger H_L em (4.2a), cujos termos são dados pela equação (4.5), somado ao Hamiltoniano de interação Zeeman H_Z em (4.6). Assim, deve-se resolver a seguinte equação de autovalores e autovetores:

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle . \quad (4.7)$$

O estado $|\Psi\rangle$ que soluciona a equação (4.7) é um *spinor* de quatro componentes, as quais são expandidas em termos dos estados da base $\{|\nu\rangle\}$ descrita no capítulo anterior:

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \sum_{\nu} C_{\nu}^{(HH,+)} |\nu\rangle \\ \sum_{\nu} C_{\nu}^{(LH,+)} |\nu\rangle \\ \sum_{\nu} C_{\nu}^{(LH,-)} |\nu\rangle \\ \sum_{\nu} C_{\nu}^{(HH,-)} |\nu\rangle \end{pmatrix} . \quad (4.8)$$

Substituindo (4.8) em (4.7) se obtém a seguinte relação:

$$\left(H_L + H_Z \right) \begin{pmatrix} \sum_{\nu} C_{\nu}^{(HH,+)} |\nu\rangle \\ \sum_{\nu} C_{\nu}^{(LH,+)} |\nu\rangle \\ \sum_{\nu} C_{\nu}^{(LH,-)} |\nu\rangle \\ \sum_{\nu} C_{\nu}^{(HH,-)} |\nu\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \sum_{\nu} C_{\nu}^{(HH,+)} |\nu\rangle \\ \sum_{\nu} C_{\nu}^{(LH,+)} |\nu\rangle \\ \sum_{\nu} C_{\nu}^{(LH,-)} |\nu\rangle \\ \sum_{\nu} C_{\nu}^{(HH,-)} |\nu\rangle \end{pmatrix} , \quad (4.9)$$

onde H_L e H_Z são dados pelas equações (4.2a) e (4.6), respectivamente. Multiplicando pela esquerda por $\langle\nu'|\nu\rangle$:

$$\sum_{\nu} [\langle\nu'|H_L|\nu\rangle + H_Z\delta_{\nu,\nu'}] \begin{pmatrix} C_{\nu}^{(HH,+)} \\ C_{\nu}^{(LH,+)} \\ C_{\nu}^{(LH,-)} \\ C_{\nu}^{(HH,-)} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_{\nu}^{(HH,+)} \\ C_{\nu}^{(LH,+)} \\ C_{\nu}^{(LH,-)} \\ C_{\nu}^{(HH,-)} \end{pmatrix} . \quad (4.10)$$

A equação (4.10) é uma equação de autovalores e autovetores, dados respectivamente por E e pelo *spinor* $\left(C_{\nu}^{(HH,+)} \ C_{\nu}^{(LH,+)} \ C_{\nu}^{(LH,-)} \ C_{\nu}^{(HH,-)} \right)^T$. Portanto, para determinar as autoenergias do sistema, deve-se expandir o Hamiltoniano de Luttinger (4.2a) na base $\{|\nu\rangle\}$, somar à matriz de interação Zeeman H_Z e diagonalizar a matriz resultante. Este procedimento será realizado na próxima seção para $\theta = 0^\circ$, e na seção seguinte será apresentado o caso de campo magnético inclinado.

4.1 Caso $\theta = 0^\circ$

Esta seção, dedicada ao caso $\theta = 0^\circ$, apresenta o cálculo dos elementos de matriz do Hamiltoniano de Luttinger H_L , e o resultado da diagonalização de $\sum_{\nu} [\langle \nu' | H_L | \nu \rangle + H_Z \delta_{\nu,\nu'}]$. O potencial vetor \mathbf{A} utilizado nesta e na próxima seção é dado pelo seguinte calibre:

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2} \cos(\theta) (-y, x, 0) - B \sin(\theta) (0, z, 0) . \quad (4.11)$$

No caso $\theta = 0^\circ$, o potencial vetor de (4.11) torna-se o calibre simétrico:

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2} (-y, x, 0) , \quad (4.12)$$

o qual descreve o campo magnético $\mathbf{B} = B \hat{\mathbf{z}}$.

Neste problema, a base $\{|\nu\rangle\}$ é composta pelos estados $|n_z, n, m\rangle$, onde $n_z = 1, 2, 3, \dots$ é o índice associado aos níveis discretos em um poço quântico infinito e unidimensional, $n = 0, 1, 2, \dots$ denota os níveis de Landau, e $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ é o número quântico azimutal associado à componente z do momento angular orbital [28]. Nota-se, pelo potencial vetor da equação (4.12), que o confinamento no plano xy já não se reduz apenas à direção $\hat{\mathbf{x}}$, como nos calibres utilizados no cálculo da banda de condução nas seções 3.1 e 3.3. Desta forma, para denotar as funções de onda que solucionam o problema no plano xy , são utilizados os

índices n e m . Assim, o estado $|\Psi\rangle$ de (4.8) é reescrito como

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \sum_{n_z, n, m} C_{n_z, n, m}^{(HH,+)} |n_z, n, m\rangle \\ \sum_{n_z, n, m} C_{n_z, n, m}^{(LH,+)} |n_z, n, m\rangle \\ \sum_{n_z, n, m} C_{n_z, n, m}^{(LH,-)} |n_z, n, m\rangle \\ \sum_{n_z, n, m} C_{n_z, n, m}^{(HH,-)} |n_z, n, m\rangle \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

A representação espacial do estado $|\Psi\rangle$ é dada pela seguinte função de onda:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle = \begin{pmatrix} \sum_{n_z, n, m} C_{n_z, n, m}^{(HH,+)} \phi_{n_z}(z) \varphi_{n, m}(r, \vartheta) \\ \sum_{n_z, n, m} C_{n_z, n, m}^{(LH,+)} \phi_{n_z}(z) \varphi_{n, m}(r, \vartheta) \\ \sum_{n_z, n, m} C_{n_z, n, m}^{(LH,-)} \phi_{n_z}(z) \varphi_{n, m}(r, \vartheta) \\ \sum_{n_z, n, m} C_{n_z, n, m}^{(HH,-)} \phi_{n_z}(z) \varphi_{n, m}(r, \vartheta) \end{pmatrix} \quad (4.14a)$$

onde

$$\phi_{n_z}(z) = \langle z | n_z \rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_z \pi}{L} z + \frac{n_z \pi}{2}\right) \quad (4.14b)$$

são as auto-funções de um poço quântico infinito em z e de largura L ; e

$$\begin{aligned} \varphi_{n, m}(r, \vartheta) = \langle r, \vartheta | n, m \rangle &= \frac{(-1)^{\min(n, m)}}{\sqrt{2\pi\ell_c^2}} \sqrt{\frac{|\min(n, m)|!}{\max(n, m)!}} \left(\frac{r}{\sqrt{2\ell_c^2}}\right)^{|n-m|} \\ &\exp\left(-\frac{r^2}{4\ell_c^2}\right) \mathcal{L}_{\min(n, m)}^{|n-m|}\left(\frac{r^2}{2\ell_c^2}\right) \exp[i(n-m)\vartheta] \end{aligned} \quad (4.14c)$$

são as funções de onda no plano xy , sendo $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ e $\vartheta = \arctan(x/y)$ coordenadas polares, e $\mathcal{L}_\beta^\alpha(x)$ funções polinomiais de Laguerre [42].

Será descrito, a partir de agora, o cálculo dos elementos de matriz $\langle m', n', n'_z | H_L | n_z, n, m \rangle$. Parte-se dos termos diagonais de H_L , $D_{HH}^{(\pm)}$ e $D_{LH}^{(\pm)}$, dados por (4.5a) e (4.5b). Ambos dependem explicitamente de \hat{k}_x , \hat{k}_y e \hat{k}_z , os quais, a partir da equação (4.4) e do potencial vetor em (4.12), são dados por

$$\hat{k}_x = -i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB}{2\hbar} y; \quad (4.15a)$$

$$\hat{k}_y = -i \frac{\partial}{\partial y} + \frac{eB}{2\hbar} x ; \quad (4.15b)$$

$$\hat{k}_z = -i \frac{\partial}{\partial z} . \quad (4.15c)$$

Assim como no Capítulo 3, serão realizadas trocas de variáveis com o intuito de tornar as variáveis de posição adimensionais. Estas trocas são dadas por:

$$x_i \rightarrow a_0 x_i , \quad \frac{\partial}{\partial x_i} \rightarrow \frac{1}{a_0} \frac{\partial}{\partial x_i} ; \quad i = 1, 2, 3 , \quad (4.16)$$

onde a_0 é um raio de Bohr efetivo dentro da heteroestrutura semicondutora, tomado aqui como sendo igual 10 nanômetros.

A partir da equação (4.15), o termo $\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2$, presente em ambos os termos diagonais de H_L , pode ser escrito como

$$\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2 = - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{(eB)^2}{4\hbar^2} (x^2 + y^2) + i \frac{eB}{\hbar} \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) ,$$

ou, utilizando a substituição de variáveis em (4.16),

$$\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2 = - \frac{1}{a_0^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{a_0^2 (eB)^2}{4\hbar^2} (x^2 + y^2) + i \frac{eB}{\hbar} \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) . \quad (4.17)$$

Multiplicando por $\frac{\hbar^2}{m_0}$, se obtém:

$$\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2 \right) = - \frac{\hbar^2}{m_0 a_0^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\hbar^2 (eB)^2 a_0^2}{4m_0 \hbar^2} (x^2 + y^2) + i \hbar \frac{eB}{m_0} \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) . \quad (4.18)$$

A fim de tornar os termos de energia adimensionais, será definida aqui, como no capítulo anterior, uma constante de Rydberg efetiva dada por $Ry^* = \frac{\hbar^2}{m_0 a_0^2} \approx 0.762$ meV, para $a_0 = 10$ nm. Assim, a equação (4.18) pode ser reescrita como

$$\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2 \right) = - Ry^* \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{(\hbar \omega_c)^2}{4Ry^*} (x^2 + y^2) + i \hbar \omega_c \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) , \quad (4.19)$$

onde $\omega_c = \frac{eB}{m_0}$ denota a frequência ciclotrônica de uma partícula de carga e e massa m_0 , na presença de um campo magnético de intensidade B , sendo que $\hbar \omega_c \approx 0.1158 \times B$ [tesla]

meV.

Pode-se notar, a partir das equações (4.5a) e (4.5b) que os termos diagonais de buraco pesado $D_{HH}^{(\pm)}$ e de buraco leve $D_{LH}^{(\pm)}$ diferem entre si apenas nos termos de massa efetiva no plano xy e na direção $\hat{\mathbf{z}}$:

$$\left(\frac{\gamma_1 \pm \gamma_2}{2}\right) \text{ e } \left(\frac{\gamma_1 \mp 2\gamma_2}{2}\right) .$$

Portanto, a partir daqui serão detalhados os cálculos de elemento de matriz apenas para $D_{HH}^{(\pm)}$, sendo que o processo é idêntico para $D_{LH}^{(\pm)}$. Substituindo (4.19) em (4.5a), e aplicando a troca de variáveis (4.16) em \hat{k}_z , se obtém a seguinte relação:

$$D_{HH}^{(\pm)} = -\left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2}\right) \left[-Ry^* \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{(\hbar\omega_c)^2}{4Ry^*} (x^2 + y^2) + i\hbar\omega_c \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] - Ry^* \left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2} \right) \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\mathbf{z}) . \quad (4.20)$$

O termo adimensional $\frac{D_{HH}^{(\pm)}}{Ry^*}$ pode ser escrito como a soma de dois termos ¹

$$\frac{D_{HH}^{(\pm)}}{Ry^*} = \mathcal{D}_{HH}^{(xy)} + \mathcal{D}_{HH}^{(z)} \quad (4.21a)$$

onde

$$\mathcal{D}_{HH}^{(xy)} = -\left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2}\right) \left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*} \right)^2 (x^2 + y^2) + i \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] , \quad (4.21b)$$

$$\mathcal{D}_{HH}^{(z)} = -\left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2}\right) \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\mathbf{z}) . \quad (4.21c)$$

É fácil demonstrar que o termo $\mathcal{D}_{HH}^{(xy)}$ pode ser escrito como

$$\mathcal{D}_{HH}^{(xy)} = -\left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2}\right) (\Pi_x^2 + \Pi_y^2) , \quad (4.22)$$

¹O mesmo é válido para os termos de buraco leve $D_{LH}^{(\pm)}$.

onde

$$\Pi_x = -i \frac{\partial}{\partial x} - \gamma y , \quad (4.23a)$$

$$\Pi_y = -i \frac{\partial}{\partial y} + \gamma x , \quad (4.23b)$$

sendo $\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*}$. Π_x e Π_y nada mais são que os operadores \hat{k}_x e \hat{k}_y (equação (4.15)) adimensionais. Pode-se definir um par de operadores de criação e aniquilação a partir dos operadores Π_x e Π_y de (4.23), os quais são dados respectivamente por [28]

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} (\Pi_x + i\Pi_y) = \frac{a_0}{2\sqrt{\gamma}} \hat{k}_+ , \quad (4.24a)$$

$$\hat{a} = \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} (\Pi_x - i\Pi_y) = \frac{a_0}{2\sqrt{\gamma}} \hat{k}_- . \quad (4.24b)$$

Estes operadores de criação e aniquilação são os mesmos que atuam sobre os estados de um oscilador harmônico simples ou, como apresentado na Seção 3.3.1, os níveis de Landau $|n\rangle$. No problema discutido neste capítulo, \hat{a}^\dagger e \hat{a} atuam sobre os estados $|n, m\rangle$ da base $\{|\nu\rangle\}$, tal como segue:

$$\hat{a}^\dagger |n, m\rangle = \sqrt{n+1} |n+1, m-1\rangle , \quad (4.25a)$$

$$\hat{a} |n, m\rangle = \sqrt{n} |n-1, m+1\rangle . \quad (4.25b)$$

Escritos em termos de \hat{a}^\dagger e \hat{a} , os operadores Π_x e Π_y são dados por

$$\Pi_x = \sqrt{\gamma} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) , \quad (4.26a)$$

$$\Pi_y = -i\sqrt{\gamma} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) . \quad (4.26b)$$

Logo,

$$\Pi_x^2 + \Pi_y^2 = 2\gamma (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) = 4\gamma \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) , \quad (4.27)$$

onde é levado em conta o comutador $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. Substituindo (4.27) em (4.22), se obtém:

$$\mathcal{D}_{HH}^{(xy)} = - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) . \quad (4.28)$$

Portanto, os elementos de matriz de $\mathcal{D}_{HH}^{(xy)}$ e $\mathcal{D}_{LH}^{(xy)}$, expandidos na base $\{|n_z, n, m\rangle\}$, são dados por

$$\begin{aligned} \langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{HH}^{(xy)} | n_z, n, m \rangle &= - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \delta_{n'_z, n_z} \langle m', n' | \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) | n, m \rangle \\ &= - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{n'_z, n_z} \delta_{n', n} \delta_{m', m} ; \end{aligned} \quad (4.29a)$$

$$\begin{aligned} \langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{LH}^{(xy)} | n_z, n, m \rangle &= - \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \delta_{n'_z, n_z} \langle m', n' | \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) | n, m \rangle \\ &= - \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{n'_z, n_z} \delta_{n', n} \delta_{m', m} . \end{aligned} \quad (4.29b)$$

Pode-se observar que os elementos de matriz de $\mathcal{D}_{HH}^{(xy)}$ e $\mathcal{D}_{LH}^{(xy)}$ representam os níveis de Landau adimensionais para os estados de buraco pesado e buraco leve, respectivamente. Há clara semelhança entre a equação (4.29) e a equação (3.17) para os níveis de Landau na banda de condução no caso $\theta = 0^\circ$.

Enquanto o termo $\mathcal{D}_{HH}^{(xy)}$ de (4.21b) atua sobre os estados $|n, m\rangle$ associados ao plano xy , o termo $\mathcal{D}_{HH}^{(z)}$ de (4.21c) atua sobre os estados $|n_z\rangle$ do subespaço z . Os elementos de matriz de $\mathcal{D}_{HH}^{(z)}$ e $\mathcal{D}_{LH}^{(z)}$ são dados por

$$\begin{aligned} \langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{HH}^{(z)} | n_z, n, m \rangle &= - \left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2} \right) \delta_{n', n} \delta_{m', m} \int_{-L/2}^{L/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) \left(-\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{z}^2} \right) \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz \\ &= - \left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2} \right) \left(\frac{n_z \pi}{L} \right)^2 \delta_{n'_z, n_z} \delta_{n', n} \delta_{m', m} ; \end{aligned} \quad (4.30a)$$

$$\begin{aligned} \langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{LH}^{(z)} | n_z, n, m \rangle &= - \left(\frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2} \right) \delta_{n', n} \delta_{m', m} \int_{-L/2}^{L/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) \left(-\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{z}^2} \right) \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz \\ &= - \left(\frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2} \right) \left(\frac{n_z \pi}{L} \right)^2 \delta_{n'_z, n_z} \delta_{n', n} \delta_{m', m} , \end{aligned} \quad (4.30b)$$

onde

$$\phi_{n_z}(\mathbf{z}) = \langle \mathbf{z} | n_z \rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{n_z \pi}{L} \mathbf{z} + \frac{n_z \pi}{2} \right) \quad (4.31)$$

são as auto-funções de um poço quântico infinito e unidimensional de largura L , sendo L adimensional e escrito em termos de a_0 . Multiplicando os elementos de matriz em (4.30)

pela constante de Rydberg efetiva $Ry^* = \frac{\hbar^2}{m_0 a_0^2}$, se obtém duas relações muito semelhantes à equação (3.14), a qual descreve os níveis de energia em um poço quântico infinito na banda de condução, com a diferença que a massa efetiva isotrópica do elétron na banda de condução, $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{(0.067 m_0)}$ (no caso do GaAs), é trocada pela massa efetiva na direção \hat{z} de buraco pesado, $\left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{m_0}\right)$, e de buraco leve, $\left(\frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{m_0}\right)$. Portanto, para cada sub-banda n_z do poço quântico infinito na banda de valência, em $B = 0$ T, há dois níveis, dados pelos elementos de matriz de (4.30) multiplicados por $Ry^* \approx 0.762$ meV.

Serão determinados, agora, os elementos de matriz dos termos não-diagonais do Hamiltoniano de Luttinger (4.2a), começando por R , o qual é dado por (4.5d):

$$R = -\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) \hat{k}_-^2 . \quad (4.32)$$

A partir da equação (4.24b) pode-se escrever R como

$$R = -\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0 a_0^2} \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) (2\sqrt{\gamma} \hat{a})^2 = -\frac{\sqrt{3}}{2} Ry^* \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) (2\sqrt{\gamma} \hat{a})^2 , \quad (4.33)$$

onde $\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*}$. Assim, o elemento de matriz de R , expandido na base $\{|n_z, n, m\rangle\}$, é dado por:

$$\begin{aligned} \langle m', n', n'_z | R | n_z, n, m \rangle &= -\frac{\sqrt{3}}{2} Ry^* (\gamma_2 + \gamma_3) \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \delta_{n'_z, n_z} \langle m', n' | (\hat{a})^2 | n, m \rangle \\ &= -\frac{\sqrt{3}}{2} (\gamma_2 + \gamma_3) \hbar\omega_c \delta_{n'_z, n_z} \sqrt{n(n-1)} \delta_{n', n-2} \delta_{m', m+2} . \end{aligned} \quad (4.34)$$

Pela posição do termo R no Hamiltoniano de Luttinger (4.2a), observa-se que o mesmo acopla estados de buraco pesado e buraco leve com orientações de spin opostas, por exemplo, estados $(HH, +)$ ($m_J = +3/2$) e $(LH, -)$ ($m_J = -1/2$). Além disso, a partir do elemento de matriz em (4.34), observa-se que estes estados devem pertencer ao mesmo nível n_z do poço quântico, e ter números quântico n e m diferindo por 2, de acordo com as deltas de Kronecker representadas.

O termo Q é apresentado pela equação (4.5c):

$$Q = \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_3 \frac{(\hat{k}_- \hat{k}_z + \hat{k}_z \hat{k}_-)}{2}. \quad (4.35)$$

No caso de campo inclinado, descrito na próxima seção, o potencial vetor \mathbf{A} é dado pela equação (4.11), e os operadores \hat{k}_z e \hat{k}_\pm não comutam entre si, tornando necessária a simetrização apresentada no termo Q em (4.35). No entanto, no caso $\theta = 0^\circ$, pode-se constatar que \hat{k}_z e \hat{k}_\pm comutam entre si, e portanto, Q assume uma forma simplificada:

$$Q = \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_3 \hat{k}_- \hat{k}_z. \quad (4.36)$$

Utilizando as relações apresentadas em (4.24b) e (4.15c), e a troca de variáveis em (4.16), o termo Q de (4.36) pode ser escrito como

$$Q = \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{m_0 a_0^2} \gamma_3 (2\sqrt{\gamma} \hat{a}) \left(-i \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \right) = \sqrt{3} Ry^* \gamma_3 (2\sqrt{\gamma} \hat{a}) \left(-i \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \right). \quad (4.37)$$

O elemento de matriz de Q é dado por

$$\begin{aligned} \langle m', n', n'_z | Q | n_z, n, m \rangle &= \sqrt{3} Ry^* \gamma_3 2 \sqrt{\frac{\hbar \omega_c}{2Ry^*}} \langle m', n' | \hat{a} | n, m \rangle \langle n'_z | \left(-i \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \right) | n_z \rangle \\ &= -2 i \sqrt{3} Ry^* \gamma_3 \sqrt{\frac{\hbar \omega_c}{2Ry^*}} \sqrt{n} \delta_{n', n-1} \delta_{m', m+1} \langle n'_z | \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \right) | n_z \rangle, \end{aligned} \quad (4.38)$$

onde

$$\langle n'_z | \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \right) | n_z \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz = - \frac{2n'_z n_z [-1 + (-1)^{n'_z + n_z}]}{L(n'^2_z + n^2_z)} \Bigg|_{n'_z \neq n_z}. \quad (4.39)$$

A posição de Q no Hamiltoniano de Luttinger em (4.2a), bem como o elemento de matriz em (4.38) e a integral da equação (4.39) dizem que: o termo Q acopla estado de buraco pesado e buraco leve com mesma orientação de spin, por exemplo, o estado $(HH, +)$ ($m_J = +3/2$) e o estado $(LH, +)$ ($m_J = +1/2$); estes estados devem se localizar em diferentes níveis n_z do poço quântico infinito, e com diferentes paridades; e os números quânticos n e m associados a um e outro estado devem ser adjacentes, de acordo com a equação (4.38).

TABELA 4.2: Parâmetros do GaAs [43, 44].

γ_1	γ_2	γ_3	κ	ζ	g^*
6.79	1.88	2.681	1.2	0.01	-0.45

Determinados os elementos de matriz dos termos do Hamiltoniano de Luttinger H_L expandidos na base $\{|\nu\rangle\} = \{|n_z, n, m\rangle\}$, deve-se realizar a diagonalização do Hamiltoniano total H , tal que:

$$H = \sum_{i,j} \sum_{\substack{n_z, n, m \\ n'_z, n', m'}} \left[\langle m', n', n'_z | (H_L)_{i,j} | n_z, n, m \rangle + (H_Z)_{i,j} \delta_{n'_z, n_z} \delta_{n', n} \delta_{m', m} \right]. \quad (4.40)$$

O procedimento de diagonalização de H foi realizado considerando um campo magnético \mathbf{B} posicionado sobre a direção de crescimento do poço quântico (definida como sendo $\hat{\mathbf{z}}$). A intensidade B do campo foi variada de 0 a 18 teslas, para um poço de largura $L = 18$ nanômetros. A base foi truncada em $n_z = 1, 2, 3, 4$, $n = 0, 1, 2, 3, 4$ e $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4$. Os parâmetros do GaAs utilizados nos cálculos são apresentados na Tabela 4.2.

Por meio da diagonalização do Hamiltoniano H são determinados os coeficientes de expansão representados na equação (4.13). E a partir destes coeficientes pode-se determinar a paridade z e o caráter de spin dos estados de energia do sistema. O caráter de spin é dado pela seguinte relação:

$$S^\pm = \sum_{n_z, n, m} \left| C_{n_z, n, m}^{(HH, \pm)} \right|^2, \quad (4.41)$$

onde o sinal ”+” indica o caráter de buraco pesado com spin para cima ($m_J = +3/2$) e o sinal ”-” está associado ao caráter de buraco pesado com spin para baixo ($m_J = -3/2$). Já a paridade em z é dada pela seguinte equação:

$$P_z^{(imp)} = \sum_{\substack{n, m, \\ n_z = \text{par}}} \left(\left| C_{n_z, n, m}^{(HH, +)} \right|^2 + \left| C_{n_z, n, m}^{(LH, +)} \right|^2 + \left| C_{n_z, n, m}^{(LH, -)} \right|^2 + \left| C_{n_z, n, m}^{(HH, -)} \right|^2 \right), \quad (4.42a)$$

$$P_z^{(par)} = \sum_{\substack{n, m, \\ n_z = \text{ímpar}}} \left(\left| C_{n_z, n, m}^{(HH, +)} \right|^2 + \left| C_{n_z, n, m}^{(LH, +)} \right|^2 + \left| C_{n_z, n, m}^{(LH, -)} \right|^2 + \left| C_{n_z, n, m}^{(HH, -)} \right|^2 \right). \quad (4.42b)$$

Os ramos de energia calculados após a diagonalização de H são apresentados na Figura 4.2².

²Estão representados apenas os níveis mais ao topo da banda de valência, ou os níveis fundamentais do poço infinito, indexados em $B = 0$ T por $n_z = 1$.

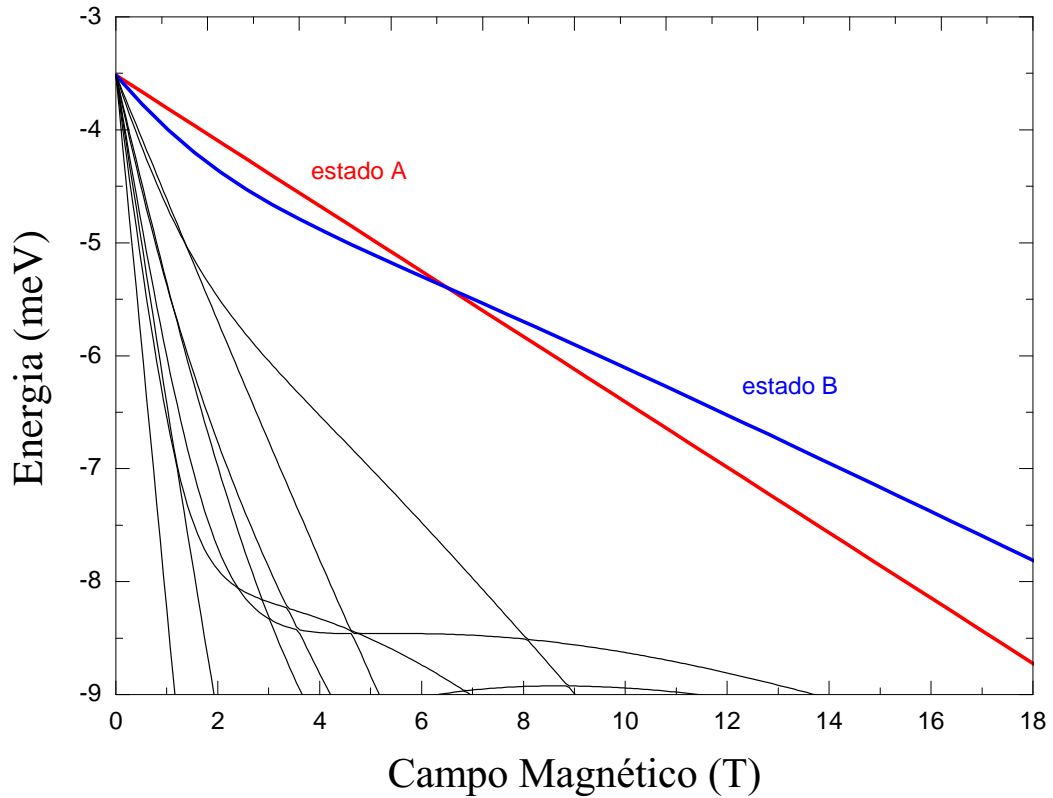


FIGURA 4.2: Curvas de energia de um poço quântico infinito de largura $L = 18$ nm, na presença de um campo magnético \mathbf{B} paralelo à direção de crescimento $\hat{\mathbf{z}}$, obtidas pela diagonalização do Hamiltoniano $H = H_L + H_Z$ expandido na base $\{|n_z, n, m\rangle\}$. Em destaque estão representados os estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$.

Nota-se que dois níveis de energia foram destacados, chamados de "estado A" e "estado B". Por meio da equação (4.41) o caráter de spin dos dois estados foi determinado e é apresentado nas Figuras 4.3a e 4.3b. Observa-se que o estado A tem caráter de spin totalmente para baixo. De fato, o mesmo é um estado $(HH, -)$ puro, dado pela relação

$$|\psi_A\rangle = C_{1,0,0}^{(HH,-)} |1, 0, 0\rangle . \quad (4.43)$$

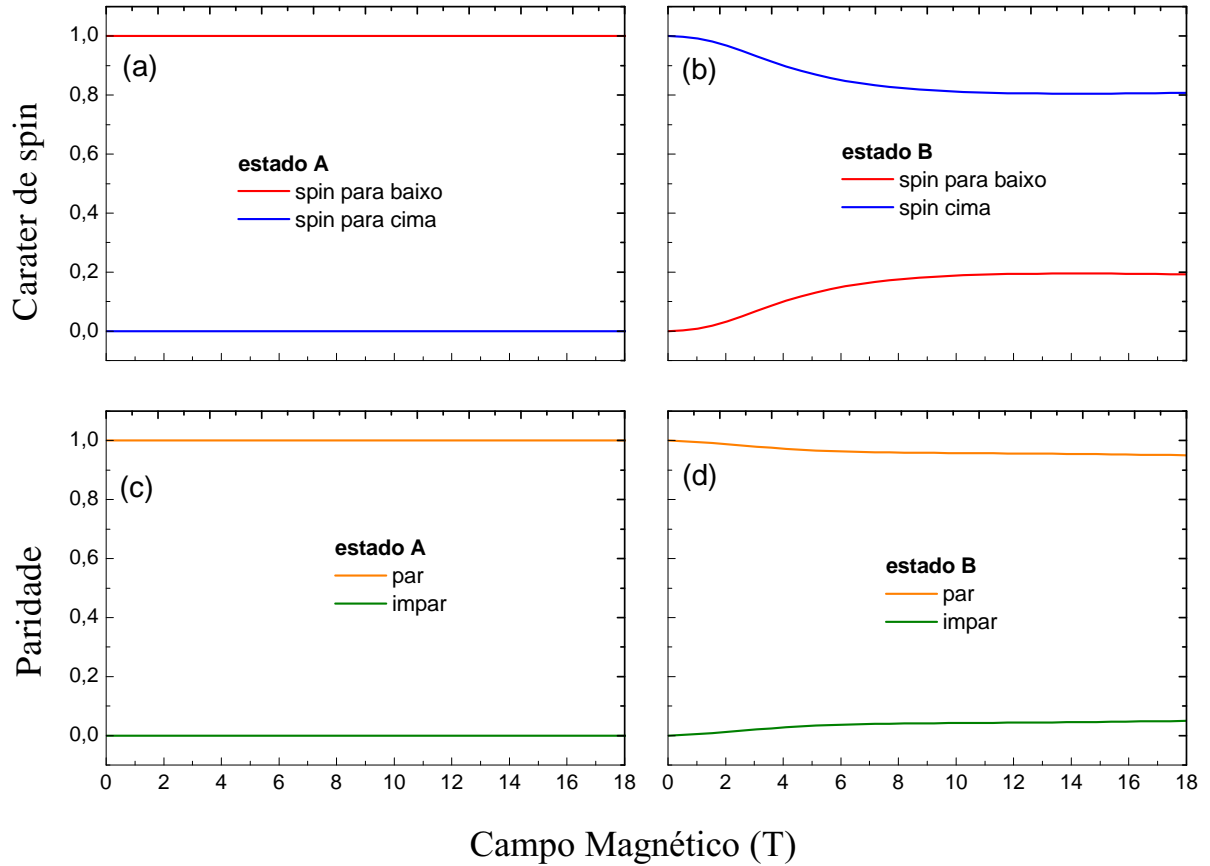


FIGURA 4.3: Caráter de spin e paridade z dos estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$ representados na Figura 4.2. Nota-se que o caráter de buraco pesado com spin para baixo e a paridade z par se mantém bem definida para o estado $|\psi_A\rangle$. No estado $|\psi_B\rangle$ a paridade z e o caráter de spin são bem definidos apenas em $B = 0$ T; isto é, para valores baixos de campo magnético, o estado $|\psi_B\rangle$, inicialmente apenas $(HH, +)$, se acopla com outros estados de buraco leve como mostra a equação (4.44).

Já o estado B é majoritariamente um estado de buraco pesado com spin para cima ($m_J = +3/2$), mas está acoplado a outros dois estados de buraco leve:

$$|\psi_B\rangle \approx C_{1,0,0}^{(HH,+)}|1, 0, 0\rangle + C_{2,1,-1}^{(LH,+)}|2, 1, -1\rangle + C_{1,2,-2}^{(LH,-)}|1, 2, -2\rangle. \quad (4.44)$$

Este acoplamento é o responsável pela subida da curva do estado $|\psi_B\rangle$ representada na Figura 4.2. Nota-se que a curva, para campo magnético próximo a zero, tem um comportamento linear semelhante ao estado $|\psi_A\rangle$. No entanto, para B menor que 1 T, o estado

de buraco pesado ($HH, +$) se acopla aos estados de buraco leve como descrito na equação (4.44). Este acoplamento pode ser observado no caráter de spin do estado B na Figura 4.3. Observa-se que em $B = 0$ T o caráter é totalmente do tipo ($HH, +$), mas que rapidamente há uma hibridização dos caracteres, que se estabiliza próximo a $B = 8$ teslas, se mantendo aproximadamente em 80% buraco pesado com spin para cima. Pode-se notar também que a participação de estados de buraco pesado com spin para baixo no estado B é quase insignificante. Os acoplamentos no estado $|\psi_B\rangle$ também tem efeito sobre a paridade z , como mostra a Figura 4.3d. Enquanto no estado $|\psi_A\rangle$ a paridade é bem definida como par, a paridade do estado B, em aproximadamente $B = 6$ T, se estabiliza em torno de 95% par e 5% ímpar.

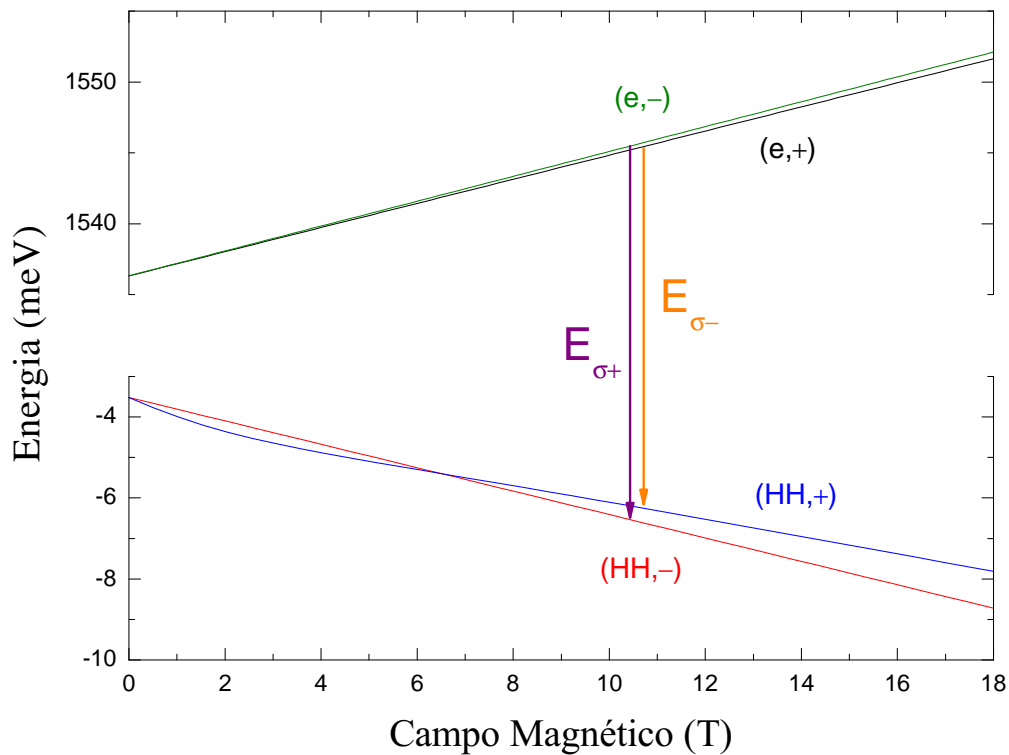


FIGURA 4.4: Representação esquemática das transições circularmente polarizadas a direita σ^+ e a esquerda σ_- entre os estados de menor energia do poço da banda de condução e os estados mais energéticos do poço quântico da banda de valência, os quais são dados pelos estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$, respectivamente do tipo ($HH, -$) e ($HH, +$). A diferença de energia entre o mínimo da banda de condução e o topo da banda de valência é dado pelo *gap* de energia do GaAs a temperatura de 0 K: $E_g = 1\,519$ meV.

Desta forma, conclui-se que os estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$ são os estados ($HH, -$) e ($HH, +$) de

maior energia³ dentro do poço quântico, e portanto, mais aptos a participarem de transições ópticas com a banda de condução. No Capítulo 1 foi descrito o experimento de MPL circularmente polarizada para os casos $\theta = 0^\circ$ e $\theta = 70^\circ$, no sistema de poços quânticos múltiplos (MQW) representado na Figura 1.2. A Figura 1.3 apresenta os picos de emissão circularmente polarizada a direita, σ^+ , e a esquerda, σ^- , medidos a partir do poço central QW_0 . O pico σ^+ está majoritariamente associado a transições entre o estado de spin para baixo menos energético no poço da banda de condução (cuja energia, medida a partir do topo da banda de valência, é dada por $E^{(e,-)} = E_g + E_0 - \frac{g^*}{2}\mu_B B$, sendo E_0 o menor autovalor do Hamiltoniano orbital H_0 dado pela equação (3.21)) e o estado de buraco pesado com spin para baixo ($m_J = -3/2$) mais energético do poço da banda de valência (aqui dado pelo estado $|\psi_A\rangle$, cuja energia é denotada por E_A). Já a emissão σ^- está principalmente associada a transições entre o estado de spin para cima de menor energia no poço da banda de condução (de energia $E^{(e,+)} = E_g + E_0 + \frac{g^*}{2}\mu_B B$) e o estado de buraco pesado de spin para cima ($m_J = +3/2$) de maior energia dentro do poço da banda de valência (que no problema em questão é o estado $|\psi_B\rangle$, de energia E_B). Assim, para cada valor de campo magnético pode-se calcular a energia das emissões σ_+ e σ_- , dadas por:

$$E_{\sigma^+} = E^{(e,-)} - E_A = E_0 - \frac{g^*}{2}\mu_B B + E_g - E_A, \quad (4.45a)$$

$$E_{\sigma^-} = E^{(e,+)} - E_B = E_0 + \frac{g^*}{2}\mu_B B + E_g - E_B, \quad (4.45b)$$

onde E_g é o valor do *gap* de energia entre o mínimo do poço da banda de condução e o mínimo do poço da banda de valência (para o GaAs, a $T = 0$ K, $E_g = 1\,519$ meV [28]). A Figura 4.4 mostra uma representação das transições σ^+ e σ^- entre os estados de menor energia da banda de condução (em verde e preto) e os estados mais energéticos da banda de valência (estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$, respectivamente em vermelho e azul).

O desdobramento de spin excitônico ΔE_Z , também conhecido por desdobramento Zeeman, é determinado pela diferença entre as energias de emissão σ^+ e σ^- . O cálculo teórico do desdobramento Zeeman é realizado utilizando a seguinte equação:

$$\Delta E_Z = E_{\sigma^-} - E_{\sigma^+}. \quad (4.46)$$

³Considera-se, no poço quântico da banda de valência, que as maiores energias estão nos estados fundamentais do poço, mais próximos do *gap*, como mostra a Figura 1.1.

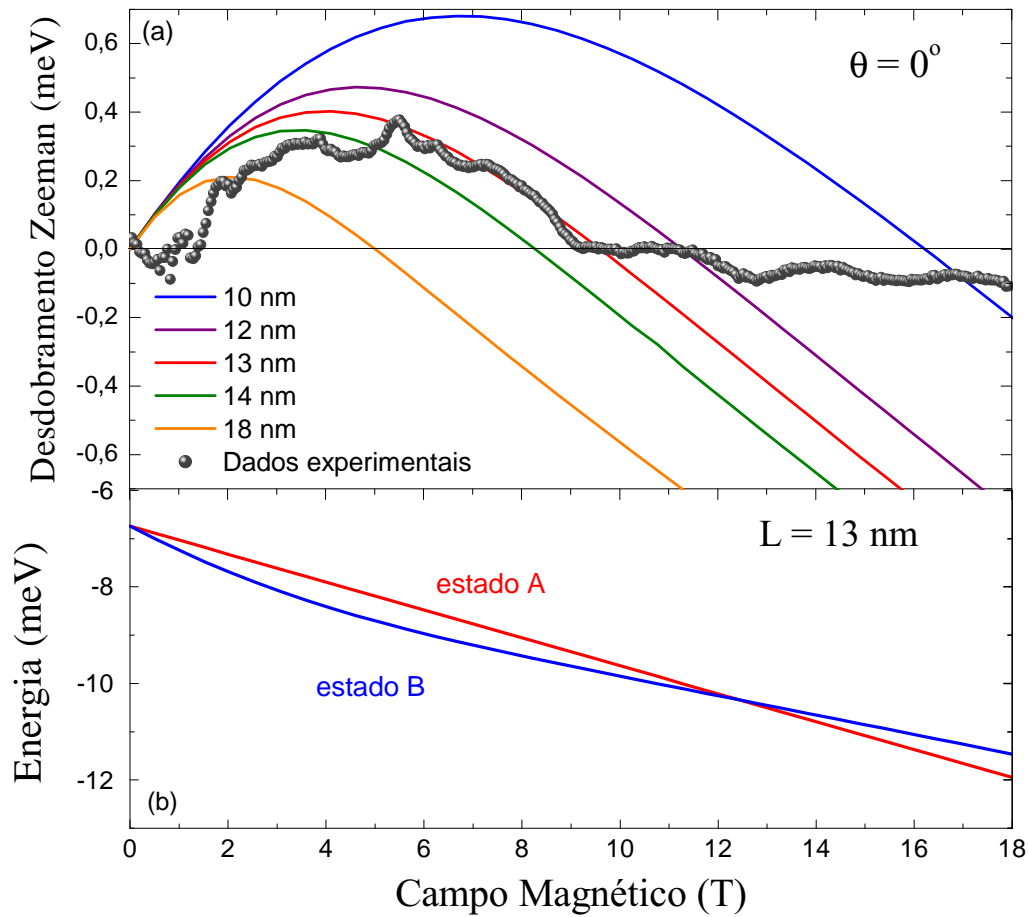


FIGURA 4.5: (a) As curvas sólidas representam o desdobramento Zeeman calculado a partir da equação (4.47) e dos estados A e B representados na Figura 4.2, para poços quântico de diferentes larguras L . Os símbolos em cinza representam os dados experimentais de ΔE_Z para a amostra de poço quântico múltiplo (Figura 1.2) na presença de um campo magnético que forma um ângulo $\theta = 0^\circ$ com sua direção de crescimento; (b) Curvas de energia dos estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$ em um poço de 13 nm de espessura, o qual gerou a curva de ΔE_Z que mostra maior concordância com os dados experimentais.

Substituindo (4.45):

$$\Delta E_Z = \left(E_0 + \frac{g^*}{2} \mu_B B + E_g - E_B \right) - \left(E_0 - \frac{g^*}{2} \mu_B B + E_g - E_A \right) = \Delta \varepsilon_S + E_A - E_B, \quad (4.47)$$

onde $\Delta \varepsilon_S = g^* \mu_B B$ é o desdobramento de spin eletrônico, que, como comentado no Capítulo 3, depende apenas da intensidade B do campo magnético e não de sua direção. Por meio da equação (4.47), utilizando as curvas de energia E_A e E_B representadas na Figura 4.2, foi calculado o desdobramento Zeeman, para poços quânticos de diferentes larguras L . As curvas teóricas obtidas são apresentadas na Figura 4.5a, juntamente com os dados experimentais de

ΔE_Z determinados a partir do poço central da amostra de MQW (os quais são apresentados na Figura 1.4a), para um campo magnético \mathbf{B} paralelo à direção de crescimento $\hat{\mathbf{z}}$.

Observa-se que as curvas de energia dos estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$, representadas na Figura 4.2 para um poço de largura $L = 18$ nm, não geraram o melhor resultado de desdobramento Zeeman. Poços menores como de 12 e 13 nm forneceram curvas teóricas de desdobramento Zeeman mais próximos do valor experimental. Na Figura 4.5b estão representadas as curvas de energias dos estados A e B para o poço de largura $L = 13$ nm. Observa-se que o cruzamento entre estes estados ocorre em um campo magnético de intensidade entre 12 e 13 teslas, diferentemente do poço de 18 nanômetros de largura, onde o cruzamento ocorre entre 6 e 7 T. O mesmo tipo de comparação será realizada na próxima seção, a qual tratará de um campo magnético \mathbf{B} inclinado em um ângulo $\theta > 0^\circ$ em relação a $\hat{\mathbf{z}}$.

4.2 Campo inclinado

Nesta seção é tratado o problema de uma heteroestrutura de poço quântico na banda de valência, na presença de um campo magnético \mathbf{B} inclinado por um ângulo θ em relação à direção de crescimento da amostra, como mostra a Figura 3.5. O campo magnético, dado pela equação (3.74), é representado pelo potencial vetor da equação (4.11):

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2} \cos(\theta) (-y, x, 0) - B \sin(\theta) (0, z, 0) . \quad (4.48)$$

A partir da equação (4.48) as componentes do operador $\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}$ são dadas por:

$$\hat{k}_x = -i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB \cos(\theta)}{2\hbar}y ; \quad (4.49a)$$

$$\hat{k}_y = -i\frac{\partial}{\partial y} + \frac{eB \cos(\theta)}{2\hbar}x - \frac{eB \sin(\theta)}{\hbar}z ; \quad (4.49b)$$

$$\hat{k}_z = -i\frac{\partial}{\partial z} . \quad (4.49c)$$

Observa-se que, em relação às componentes apresentadas na equação (4.15) e obtidas do calibre simétrico (4.12), houve a inclusão do fator cosseno nos termos proporcionais ao campo B já antes existente, além de um termo proporcional a $z \sin(\theta)$ na componente \hat{k}_y .

Assim como na seção anterior ($\theta = 0^\circ$) serão determinados os elementos de matriz do Hamiltoniano de Luttinger H_L (4.2a) expandido na base $\{|n_z, n, m\rangle\}$. Começando pelos termos diagonais de H_L , $D_{HH}^{(\pm)}$ e $D_{LH}^{(\pm)}$, dados por (4.5a) e (4.5b).

$$D_{HH}^{(\pm)} = -\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) (\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) - \frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2} \right) \hat{k}_z^2 + V(z), \quad (4.50a)$$

$$D_{LH}^{(\pm)} = -\frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2} \right) (\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) - \frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2} \right) \hat{k}_z^2 + V(z). \quad (4.50b)$$

Ambos dependem do termo $\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2$, o qual, a partir da equação (4.49) e da substituição de variáveis em (4.16), pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2 = & -\frac{1}{a_0^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{(eB)^2}{4\hbar^2} \cos^2(\theta) a_0^2 (x^2 + y^2) + \frac{(eB)^2}{\hbar^2} \sin^2(\theta) a_0^2 z^2 \\ & + i \frac{eB}{\hbar} \cos(\theta) \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) + 2 i \frac{eB}{\hbar} \sin(\theta) z \frac{\partial}{\partial y} - \frac{(eB)^2}{\hbar^2} \sin(\theta) \cos(\theta) a_0^2 x z, \end{aligned} \quad (4.51)$$

onde $a_0 = 10$ nm é o raio de Bohr efetivo dentro da heteroestrutura de poço quântico. Multiplicando (4.51) por $\frac{\hbar^2}{m_0}$, se obtém:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{m_0} (\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2) = & -Ry^* \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{(\hbar\omega_c)^2}{4Ry^*} \cos^2(\theta) (x^2 + y^2) + \frac{(\hbar\omega_c)^2}{Ry^*} \sin^2(\theta) z^2 \\ & + i \hbar\omega_c \cos(\theta) \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) + 2 i \hbar\omega_c \sin(\theta) z \frac{\partial}{\partial y} - \frac{(\hbar\omega_c)^2}{Ry^*} \sin(\theta) \cos(\theta) x z, \end{aligned} \quad (4.52)$$

onde $Ry^* = \frac{\hbar^2}{m_0 a_0^2}$ é a constante de Rydberg efetiva, cujo valor para $a_0 = 10$ nm é de aproximadamente 0.762 meV; além disso, $\omega_c = \frac{eB}{m_0}$ é a frequência ciclotrônica de uma partícula de carga e e massa m_0 em um campo magnético de intensidade B , sendo $\hbar\omega_c \approx 0.1158 \times B[\text{teslas}]$ meV.

Da mesma forma que na Seção 4.1, serão descritos os passos matemáticos apenas para o termo diagonal de buraco pesado $D_{HH}^{(\pm)}$, frisando que o mesmo procedimento é válido para o termo de buraco leve $D_{LH}^{(\pm)}$, já que a diferença entre os dois se encontra apenas nos parâmetros de Luttinger em suas massas efetivas. Assim, substituindo (4.52) em (4.50a), e

dividindo por Ry^* , obtém-se:

$$\frac{D_{HH}^{(\pm)}}{Ry^*} = \mathcal{D}_{HH}^{(xy)} + \mathcal{D}_{HH}^{(z)} + \mathcal{D}_{HH}^{(1)} + \mathcal{D}_{HH}^{(2)}, \quad (4.53a)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{HH}^{(xy)} = - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) & \left[- \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*} \right)^2 \cos^2(\theta) (x^2 + y^2) \right. \\ & \left. + i \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \cos(\theta) \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.53b)$$

$$\mathcal{D}_{HH}^{(z)} = - \left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2} \right) \left(- \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z), \quad (4.53c)$$

$$\mathcal{D}_{HH}^{(1)} = - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) \left(\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \right)^2 \sin^2(\theta) z^2, \quad (4.53d)$$

$$\mathcal{D}_{HH}^{(2)} = - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) \left[-2 i \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) z \frac{\partial}{\partial y} - \left(\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \right)^2 \sin(\theta) \cos(\theta) x z \right]. \quad (4.53e)$$

Portanto, além dos termos $\mathcal{D}_{HH}^{(xy)}$ e $\mathcal{D}_{HH}^{(z)}$ presentes no caso $\theta = 0^\circ$, são somados os termos $\mathcal{D}_{HH}^{(1)}$ e $\mathcal{D}_{HH}^{(2)}$, proporcionais a $\sin(\theta)$, e que carregam os efeitos de campo inclinado sobre os termos diagonais do Hamiltoniano de Luttinger H_L .

Do mesmo modo que na seção anterior, pode-se escrever o termo $\mathcal{D}_{HH}^{(xy)}$ da seguinte forma:

$$\mathcal{D}_{HH}^{(xy)} = - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) (\Pi_x^2 + \Pi_y^2), \quad (4.54)$$

onde os operadores Π_x e Π_y são dados por

$$\Pi_x = -i \frac{\partial}{\partial x} - \gamma y, \quad (4.55a)$$

$$\Pi_y = -i \frac{\partial}{\partial y} + \gamma x, \quad (4.55b)$$

onde $\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*} \cos(\theta)$. Segundo a equação (4.26) os operadores Π_x e Π_y podem ser escritos em termos dos operadores de criação e aniquilação, \hat{a}^\dagger e \hat{a} , cuja atuação sobre os estados

$|n, m\rangle$ da base é descrita pela equação (4.25):

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger |n, m\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1, m-1\rangle, \\ \hat{a} |n, m\rangle &= \sqrt{n} |n-1, m+1\rangle.\end{aligned}$$

Portanto, o termo $\mathcal{D}_{HH}^{(xy)}$ de (4.54) pode ser escrito como

$$\mathcal{D}_{HH}^{(xy)} = - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \cos(\theta) \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.56)$$

Assim, os elementos de matriz de $\mathcal{D}_{HH}^{(xy)}$ e $\mathcal{D}_{LH}^{(xy)}$, ao serem expandidos na base $\{|n_z, n, m\rangle\}$, são dados por

$$\begin{aligned}\langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{HH}^{(xy)} | n_z, n, m \rangle &= - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \cos(\theta) \delta_{n'_z, n_z} \langle m', n' | \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) | n, m \rangle \\ &= - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \cos(\theta) \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{n'_z, n_z} \delta_{n', n} \delta_{m', m},\end{aligned} \quad (4.57a)$$

$$\begin{aligned}\langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{LH}^{(xy)} | n_z, n, m \rangle &= - \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \cos(\theta) \delta_{n'_z, n_z} \langle m', n' | \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) | n, m \rangle \\ &= - \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \cos(\theta) \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{n'_z, n_z} \delta_{n', n} \delta_{m', m}.\end{aligned} \quad (4.57b)$$

Os elementos de matriz de $\mathcal{D}_{HH}^{(z)}$ e $\mathcal{D}_{LH}^{(z)}$ são os mesmos apresentados na seção anterior, por meio da equação (4.30):

$$\begin{aligned}\langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{HH}^{(z)} | n_z, n, m \rangle &= - \left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2} \right) \delta_{n', n} \delta_{m', m} \int_{-L/2}^{L/2} \phi_{n'_z}^*(z) \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi_{n_z}(z) dz \\ &= - \left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2} \right) \left(\frac{n_z \pi}{L} \right)^2 \delta_{n'_z, n_z} \delta_{n', n} \delta_{m', m};\end{aligned} \quad (4.58a)$$

$$\begin{aligned}\langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{LH}^{(z)} | n_z, n, m \rangle &= - \left(\frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2} \right) \delta_{n', n} \delta_{m', m} \int_{-L/2}^{L/2} \phi_{n'_z}^*(z) \left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi_{n_z}(z) dz \\ &= - \left(\frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2} \right) \left(\frac{n_z \pi}{L} \right)^2 \delta_{n'_z, n_z} \delta_{n', n} \delta_{m', m},\end{aligned} \quad (4.58b)$$

onde

$$\phi_{n_z}(\mathbf{z}) = \langle \mathbf{z} | n_z \rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{n_z \pi}{L} \mathbf{z} + \frac{n_z \pi}{2} \right) \quad (4.59)$$

são as auto-funções em um poço quântico infinito de largura adimensional L .

Enquanto os elementos de matriz em (4.58) fornecem, se multiplicadas por $Ry^* \approx 0.762$ meV, as energias de buracos pesados e leves em cada nível n_z de um poço quântico infinito de largura L , os elementos de matriz em (4.57), também se multiplicados por Ry^* , geram termos de energia equivalentes aos níveis de Landau em $\theta = 0^\circ$ para cada partícula na banda de valência. Serão discutidos a partir de agora os termos de campo inclinado presentes nos termos diagonais do Hamiltoniano de Luttinger, começando com $\mathcal{D}_{HH}^{(1)}$ e $\mathcal{D}_{LH}^{(1)}$. Seus elementos de matriz são dados por

$$\langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{HH}^{(1)} | n_z, n, m \rangle = - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) \left(\frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} \right)^2 \sin^2(\theta) \delta_{n',n} \delta_{m',m} \langle n'_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle ; \quad (4.60a)$$

$$\langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{LH}^{(1)} | n_z, n, m \rangle = - \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2} \right) \left(\frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} \right)^2 \sin^2(\theta) \delta_{n',n} \delta_{m',m} \langle n'_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle , \quad (4.60b)$$

onde

$$\langle n'_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) \mathbf{z}^2 \phi_{n_z}(\mathbf{z}) dz = \begin{cases} \frac{L^2}{\pi^2} \left(\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2n_z^2} \right) ; & n'_z = n_z \\ \frac{4L^2 n'_z n_z [1 + (-1)^{n'_z + n_z}]}{\pi^2 (n'^2_z - n_z^2)^2} ; & n'_z \neq n_z \end{cases} \quad (4.61)$$

O termo $\mathcal{D}_{HH}^{(2)}$, dado por (4.53e), pode ser reorganizado da seguinte maneira:

$$\mathcal{D}_{HH}^{(2)} = - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) \mathbf{z} \left[-i \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} + \frac{\hbar \omega_c}{2Ry^*} \cos(\theta) \mathbf{x} \right]$$

ou, a partir da equação (4.55b),

$$\mathcal{D}_{HH}^{(2)} = - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) 2 \frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) \mathbf{z} \Pi_y . \quad (4.62)$$

O operador Π_y , por meio da equação (4.26b), é escrito em termos dos operadores de levantamento \hat{a}^\dagger e abaixamento \hat{a} assim como segue:

$$\Pi_y = -i\sqrt{\gamma} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) , \quad (4.63)$$

onde, para um campo magnético inclinado em um ângulo θ , $\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*} \cos(\theta)$. Substituindo (4.63) em (4.62), se obtém:

$$\mathcal{D}_{HH}^{(2)} = i \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) 2 \left(\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{\cos(\theta)}{2}} \sin(\theta) (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \mathbf{z} . \quad (4.64)$$

Os elementos de matriz dos termos $\mathcal{D}_{HH}^{(2)}$ e $\mathcal{D}_{LH}^{(2)}$ são dados por

$$\begin{aligned} & \langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{HH}^{(2)} | n_z, n, m \rangle \\ & = i \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) \sqrt{2 \cos(\theta)} \left(\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \right)^{3/2} \sin(\theta) \langle m', n' | (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) | n, m \rangle \langle n'_z | \mathbf{z} | n_z \rangle ; \end{aligned} \quad (4.65a)$$

$$\begin{aligned} & \langle m', n', n'_z | \mathcal{D}_{LH}^{(2)} | n_z, n, m \rangle \\ & = i \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2} \right) \sqrt{2 \cos(\theta)} \left(\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \right)^{3/2} \sin(\theta) \langle m', n' | (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) | n, m \rangle \langle n'_z | \mathbf{z} | n_z \rangle , \end{aligned} \quad (4.65b)$$

onde

$$\langle m', n' | (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) | n, m \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \delta_{m',m-1} - \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \delta_{m',m+1} , \quad (4.66)$$

$$\langle n'_z | \mathbf{z} | n_z \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \phi_{n'_z}^*(\mathbf{z}) \mathbf{z} \phi_{n_z}(\mathbf{z}) d\mathbf{z} = \frac{4Ln'_zn_z [-1 + (-1)^{n'_z+n_z}]}{\pi^2 (n'_z{}^2 - n_z^2)^2} \Big|_{n'_z \neq n_z} . \quad (4.67)$$

Determinados os elementos de matriz dos termos diagonais do Hamiltoniano de Luttinger (equação (4.2a)), volta-se a atenção aos termos não-diagonais, começando por R , dado pela equação (4.5d):

$$R = -\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) \hat{k}_-^2 . \quad (4.68)$$

No caso $\theta = 0^\circ$ descrito na seção anterior, os operadores \hat{k}_\pm são dados pela seguinte relação:

$$\hat{k}_\pm = \hat{k}_x \pm i\hat{k}_y = \frac{1}{a_0} (\Pi_x \pm i\Pi_y) ,$$

onde os operadores Π_x e Π_y são dados pela equação (4.23). No entanto, no caso de campo inclinado ocorrem modificações, como o calibre \mathbf{A} da equação (4.48) em relação ao da equação (4.12). Esta modificação do potencial vetor implica em mudanças nas componentes do operador vetor de onda $\hat{\mathbf{k}}$, as quais são dadas pela equação (4.49). Utilizando estas componentes, será explicitado o operador k_- presente no termo R em (4.68). Assim,

$$\begin{aligned} \hat{k}_x &= -i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB \cos(\theta)}{2\hbar}y = \frac{1}{a_0} \left(-i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar eB m_0 a_0^2}{2m_0 \hbar^2} \cos(\theta) y \right) \\ &= \frac{1}{a_0} \left(-i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*} \cos(\theta) y \right) = \frac{1}{a_0} \Pi_x , \end{aligned} \quad (4.69a)$$

$$\begin{aligned} \hat{k}_y &= -i\frac{\partial}{\partial y} + \frac{eB \cos(\theta)}{2\hbar}x - \frac{eB \sin(\theta)}{\hbar}z \\ &= \frac{1}{a_0} \left(-i\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\hbar eB m_0 a_0^2}{2m_0 \hbar^2} \cos(\theta) x - \frac{\hbar eB m_0 a_0^2}{m_0 \hbar^2} \sin(\theta) z \right) \\ &= \frac{1}{a_0} \left(\Pi_y - \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) z \right) , \end{aligned} \quad (4.69b)$$

onde os operadores Π_x e Π_y são dados pela equação (4.55). Portanto, o operador \hat{k}_- é dado pela seguinte relação:

$$\hat{k}_- = \frac{1}{a_0} \left(\Pi_x - i\Pi_y + i\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) z \right) , \quad (4.70)$$

onde, como pode-se observar, há a inclusão de um termo proporcional a $z \sin(\theta)$ no caso de campo magnético inclinado. Pela definição do operador de abaixamento \hat{a} , dada pela equação (4.24b),

$$\hat{a} = \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} (\Pi_x - i\Pi_y) ,$$

pode-se escrever o operador \hat{k}_- como

$$\hat{k}_- = \frac{1}{a_0} \left(2\sqrt{\gamma}\hat{a} + i\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) z \right) . \quad (4.71)$$

onde $\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2Ry^*} \cos(\theta)$. Substituindo o operador \hat{k}_- da equação (4.71) em (4.68), se obtém:

$$R = -\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0 a_0^2} \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) \left[2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \cos(\theta) \hat{a}^2 - \left(\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \right)^2 \sin^2(\theta) \mathbf{z}^2 + 2 i \sqrt{2 \cos(\theta)} \left(\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \right)^{3/2} \sin(\theta) \hat{a} \mathbf{z} \right]. \quad (4.72)$$

A expansão do termo R em (4.70) na base $\{|n_z, n, m\rangle\}$ resulta no seguinte elemento de matriz:

$$\langle m', n', n'_z | R | n_z, n, m \rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2} Ry^* \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) \left[2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \cos(\theta) \delta_{n'_z, n_z} \langle m', n' | \hat{a}^2 | n, m \rangle - \left(\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \right)^2 \sin^2(\theta) \delta_{n', n} \delta_{m', m} \langle n'_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle + 2 i \sqrt{2 \cos(\theta)} \left(\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \right)^{3/2} \sin(\theta) \langle m', n' | \hat{a} | n, m \rangle \langle n'_z | \mathbf{z} | n_z \rangle \right], \quad (4.73)$$

ou

$$\langle m', n', n'_z | R | n_z, n, m \rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2} Ry^* \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) \times \left[2 \frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \cos(\theta) \delta_{n'_z, n_z} \sqrt{n(n-1)} \delta_{n', n-2} \delta_{m', m+2} - \left(\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \right)^2 \sin^2(\theta) \delta_{n', n} \delta_{m', m} \langle n'_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle + 2 i \sqrt{2 \cos(\theta)} \left(\frac{\hbar\omega_c}{Ry^*} \right)^{3/2} \sin(\theta) \sqrt{n} \delta_{n', n-1} \delta_{m', m+1} \langle n'_z | \mathbf{z} | n_z \rangle \right], \quad (4.74)$$

onde as integrais $\langle n'_z | \mathbf{z}^2 | n_z \rangle$ e $\langle n'_z | \mathbf{z} | n_z \rangle$ são dadas, respectivamente, pelas equações (4.61) e (4.67).

Por fim, o termo Q é dado pela equação (4.5c):

$$Q = \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_3 \frac{(\hat{k}_- \hat{k}_z + \hat{k}_z \hat{k}_-)}{2}, \quad (4.75)$$

onde \hat{k}_z , considerando a substituição de variáveis em (4.16), é dado por

$$\hat{k}_z = \frac{1}{a_0} \left(-i \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (4.76)$$

e \hat{k}_- é descrito pela equação (4.71). Substituindo \hat{k}_z e \hat{k}_- na equação (4.75), se obtém

$$Q = \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{m_0 a_0^2} \gamma_3 \frac{1}{2} \left[\left(2\sqrt{\gamma} \hat{a} + i \frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) z \right) \left(-i \frac{\partial}{\partial z} \right) + \left(-i \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(2\sqrt{\gamma} \hat{a} + i \frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) z \right) \right] \quad (4.77)$$

ou

$$Q = \sqrt{3} Ry^* \gamma_3 \frac{1}{2} \left[-2 i \sqrt{\gamma} \hat{a} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) z \frac{\partial}{\partial z} - 2 i \sqrt{\gamma} \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) \hat{a} + \frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) z \right]. \quad (4.78)$$

Sabe-se que os operadores \hat{a} e $\frac{\partial}{\partial z}$ comutam entre si. Portanto, pode-se escrever o termo Q de (4.78) como

$$Q = \sqrt{3} Ry^* \gamma_3 \left[-2 i \sqrt{\gamma} \hat{a} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2} \frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) \left(z \frac{\partial}{\partial z} + \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) z \right) \right]. \quad (4.79)$$

Assim, o elemento de matriz do termo Q na base $\{|n_z, n, m\rangle\}$ é dado por

$$\langle m', n', n'_z | Q | n_z, n, m \rangle = \sqrt{3} Ry^* \gamma_3 \left[-i \sqrt{2 \cos(\theta)} \left(\frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} \right)^{1/2} \sqrt{n} \delta_{n', n-1} \delta_{m', m+1} \langle n'_z | \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) | n_z \rangle + \frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} \sin(\theta) \delta_{n', n} \delta_{m', m} \langle n'_z | \frac{1}{2} \left(z \frac{\partial}{\partial z} + \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) z \right) | n_z \rangle \right] \quad (4.80)$$

onde

$$\langle n'_z | \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) | n_z \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \phi_{n'_z}^*(z) \frac{\partial}{\partial z} \phi_{n_z}(z) dz = - \frac{2n'_z n_z [-1 + (-1)^{n'_z + n_z}]}{L (n'_z{}^2 - n_z^2)} \Bigg|_{n'_z \neq n_z}, \quad (4.81)$$

$$\begin{aligned} \langle n'_z | \frac{1}{2} \left(z \frac{\partial}{\partial z} + \left(\frac{\partial}{\partial z} \right) z \right) | n_z \rangle &= \frac{1}{2} \left[\int_{-L/2}^{L/2} \phi_{n'_z}^*(z) z \frac{\partial}{\partial z} \phi_{n_z}(z) dz \right. \\ &+ \left. \int_{-L/2}^{L/2} \phi_{n'_z}^*(z) \frac{\partial}{\partial z} z \phi_{n_z}(z) dz \right] = - \frac{n'_z n_z [1 + (-1)^{n'_z + n_z}]}{n'_z{}^2 - n_z^2} \Bigg|_{n'_z \neq n_z}. \end{aligned} \quad (4.82)$$

A partir dos elementos de matriz das equações (4.57), (4.58), (4.60), (4.65), (4.74) e

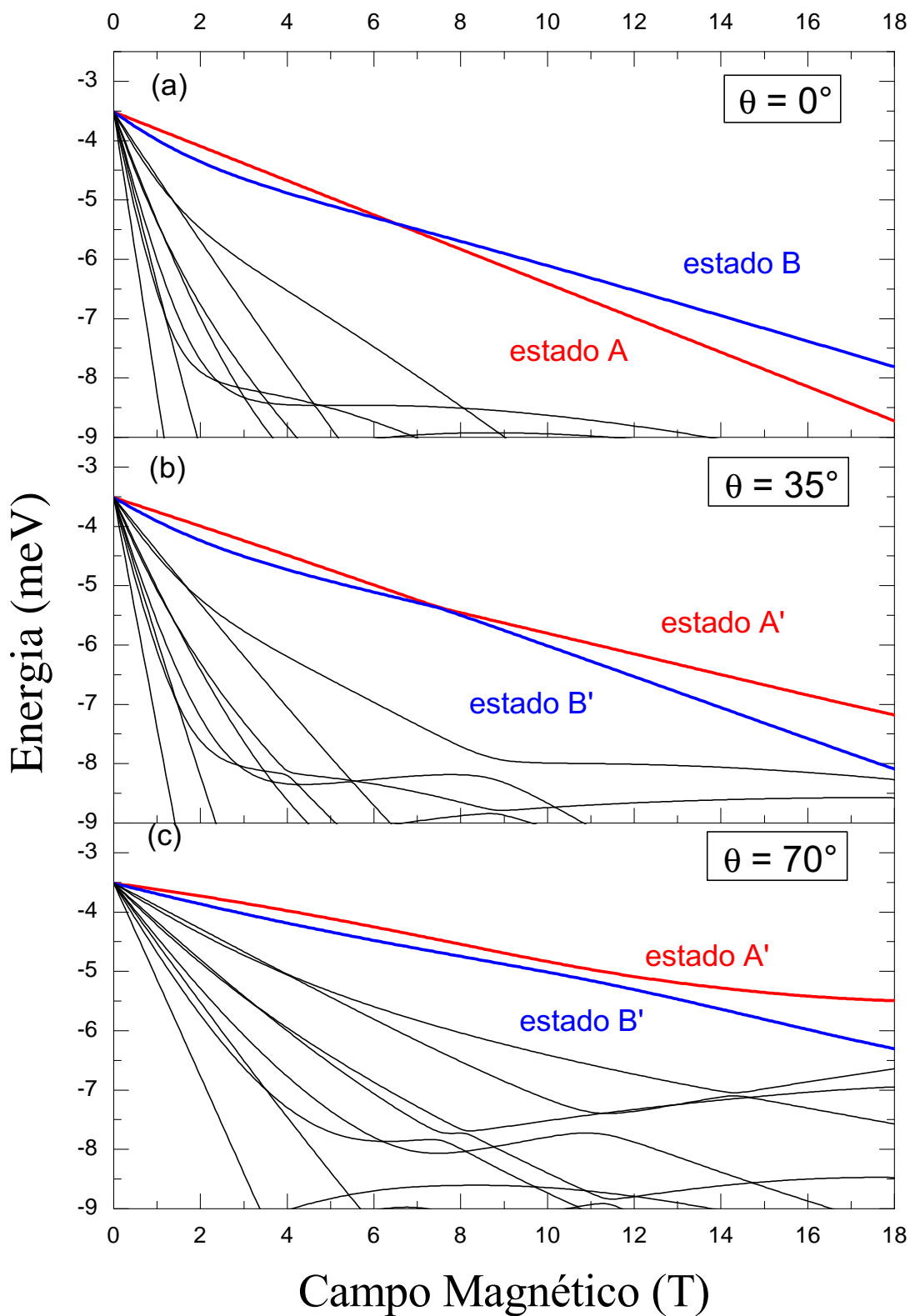


FIGURA 4.6: Curvas de energia em função da intensidade B do campo magnético em um poço quântico de 18 nm, onde em (a) o campo \mathbf{B} está apontado sobre a direção de confinamento $\hat{\mathbf{z}}$ do poço, e em (b) e (c) o campo magnético está inclinado em relação a $\hat{\mathbf{z}}$ por um ângulo $\theta = 35^\circ$ e $\theta = 70^\circ$, respectivamente.

(4.80) o Hamiltoniano de Luttinger foi expandido na base $\{|n_z, n, m\rangle\}$ e, somado ao Hamiltoniano de interação Zeeman H_z de (4.6), o Hamiltoniano H do problema foi construído, utilizando a equação (4.40), sendo que a base foi truncada da mesma maneira que no caso $\theta = 0^\circ$: $n_z = 1, 2, 3, 4$, $n = 0, 1, 2, 3, 4$ e $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4$. A Figura 4.6 apresenta os níveis de energia calculados pela diagonalização de H , para um poço de largura $L = 18$ nm. Em (a) é apresentado o caso em que o campo magnético \mathbf{B} aponta paralelamente à direção de confinamento $\hat{\mathbf{z}}$ do poço quântico. Em (b) e (c) são apresentados os casos de campo inclinado considerados neste trabalho: 35° e 70° .

Os estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$ representados na Figura 4.6a são os mesmos apresentados na Figura 4.2 e dados pelas equações (4.43) e (4.44). Pelo cálculo de caráter de spin por meio da equação (4.42) concluiu-se que o estado $|\psi_A\rangle$ é do tipo buraco pesado com spin para baixo ($HH, -$), e que o estado $|\psi_B\rangle$ é essencialmente do tipo buraco pesado com spin para cima ($HH, +$). Além disso, observa-se em $\theta = 0^\circ$ que os estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$ não se acoplam, ocorrendo apenas um cruzamento entre seus ramos de energia.

Por outro lado, quando há uma inclinação $\theta \neq 0^\circ$ entre os vetores \mathbf{B} e $\hat{\mathbf{z}}$, há a adição de um termo proporcional a $z \sin(\theta)$ ao calibre simétrico em (4.12), gerando o potencial vetor \mathbf{A} dado pela equação (4.48). Assim, no caso de campo magnético inclinado, termos proporcionais a z e z^2 passam a atuar no Hamiltoniano H do sistema, gerando acoplamentos entre sub-bandas n_z e n'_z de mesma paridade (por meio dos elementos de matriz de $\mathcal{D}_{HH}^{(1)}$, $\mathcal{D}_{LH}^{(1)}$, R e Q , dados, respectivamente, pelas equações (4.60a), (4.60b), (4.74) e (4.80)) e de paridades diferentes (a partir dos elementos de matriz de R e Q , além de $\mathcal{D}_{HH}^{(2)}$ e $\mathcal{D}_{LH}^{(2)}$ em (4.65a) e (4.65b)). Estes acoplamentos no subespaço z , somados a acoplamentos do plano xy entre estados $|n, m\rangle$ e $|n', m'\rangle$, além dos termos não-diagonais do Hamiltoniano de interação Zeeman H_Z (equação (4.6)), são responsáveis por modificações nos ramos de energia associados aos estados do sistema. Os estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$ de $\theta = 0^\circ$ dão lugar, na presença de um campo inclinado, a estados correspondentes denominados estados A' e B' , ou $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$, os quais (pelo menos para baixos valores de B) assumem o papel de estados ($HH, -$) e ($HH, +$), respectivamente.

Por meio das equações (4.41) e (4.42) é possível calcular o caráter de spin e a paridade z dos estados do sistema. Para os estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$, estas grandezas foram calculadas e estão representadas na Figura 4.3, para um poço de 18 nanômetros de largura. Nesta seção

são apresentados o caráter de spin e a paridade z dos estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$ para campos inclinados em $\theta = 35^\circ$ e $\theta = 70^\circ$. Estes resultados são apresentados na Figura 4.7 para $\theta = 35^\circ$, e na Figura 4.8 para 70° .

A Figura 4.6 deixa evidente que a inclinação de 35° do campo magnético pouco modifica as curvas de energia do sistema em relação ao caso $\theta = 0^\circ$. Basicamente, ramos que em (a) se cruzavam passam a se anticruzar, indicando a ocorrência de acoplamentos entre estados da primeira sub-banda do poço quântico. Os estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$, representados na Figura 4.7a, aparentemente se cruzam, de modo semelhante a $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$ em $\theta = 0^\circ$. No entanto, no detalhe deste mesmo gráfico observa-se que os ramos de energia destes dois estados se anticruzam. Este é um indício que a interação entre eles é muito fraca, apesar de não ser nula. Esta interação ocorre, em primeiro lugar, devido ao surgimento, em campo inclinado, do elemento não-diagonal $(H_Z)_{1,4}$ do Hamiltoniano de interação Zeeman (4.6), o qual acopla estados $(HH, +)$ e $(HH, -)$ pertencentes à mesma sub-banda n_z , e com os mesmos números quânticos n e m . Por outro lado, podem haver interações indiretas entre os estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$, promovidas pelo Hamiltoniano de Luttinger H_L em (4.2). Nota-se que, próximo ao campo crítico $B_c \approx 7.6$ T em que há o anticruzamento, a paridade do estado A', até então 100% par, assume o comportamento do estado B', com aproximadamente 95% de paridade par, valor igual à paridade do estado $|\psi_B\rangle$ representada na Figura 4.3d. O contrário é observado para o estado B', que torna-se puramente par até um campo magnético próximo a 15 teslas, onde interações com outras sub-bandas tendem a levemente hibridizar sua paridade.

Em relação ao caráter de spin, observa-se que, para $B < B_c$, os caracteres dos estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$ são praticamente iguais aos dos estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$ representados na Figura 4.3. No entanto, na região de campo magnético em que ocorre o anticruzamento, os caracteres de spin dos dois estados é invertido, de maneira rápida mas não abrupta, como mostram os gráficos em (d) e (f). O fato dos caracteres de spin dos estados A' e B' serem, para campos maiores que B_c , muito próximos dos valores observados respectivamente para B e A em $\theta = 0^\circ$ indica que a interação entre os estados A' e B' se dá apenas em torno do campo crítico, e o fraco acoplamento entre os mesmos faz com que o anticruzamento possa muito bem ser interpretado como um cruzamento entre $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$.

No gráfico da Figura 4.7b estão representadas as curvas de desdobramento de spin do

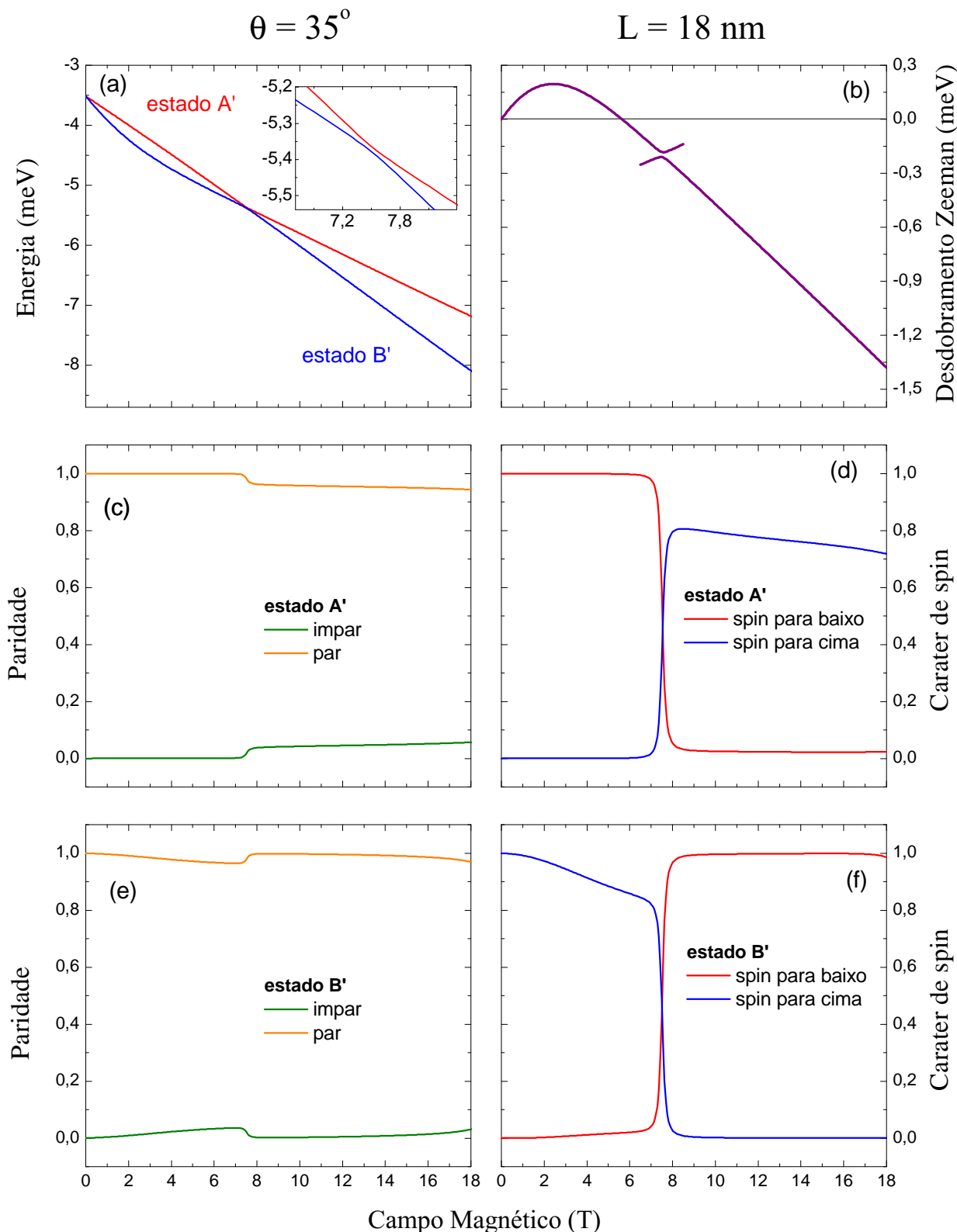


FIGURA 4.7: No detalhe em (a), observa-se que os estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$ se anticruzam, apesar da interação entre eles ser muito fraca. O anticruzamento pode ser constatado no caráter de spin de ambos os estados (gráficos (d) e (f)), em que há a troca de caráter em torno do campo magnético crítico $B_c \approx 7.6$ T, além da troca de paridade nos gráficos em (c) e (e). No gráfico (b) a uma pequena descontinuidade da curva de ΔE_Z , a qual é atribuída à uma hibridização dos estados A' e B' em torno de B_c . Mas, de modo geral, a forma da curva de desdobramento Zeeman é idêntica ao do caso $\theta = 0^\circ$, mostrado na Figura 4.5.

par elétron-buraco ΔE_Z , obtidas a partir dos ramos de energia dos estados A' e B', e da equação (4.47),

$$\Delta E_Z = \left(E_0 + \frac{g^*}{2} \mu_B B + E_g - E_B \right) - \left(E_0 - \frac{g^*}{2} \mu_B B + E_g - E_A \right) = \Delta \varepsilon_S + E_A - E_B , \quad (4.83)$$

com E_A e E_B denotando, respectivamente, a energia dos estados do tipo buraco pesado com spin para baixo e buraco pesado com spin para cima. Observa-se que há uma descontinuidade na curva de ΔE_Z , e que para uma estreita faixa de campo magnético duas curvas de desdobramento Zeeman são consideradas. A parte superior desta curva foi obtida por meio da equação (4.83), tomando o estado A' como estado de buraco pesado com spin para baixo ($HH, -$), e o estado B' como estado de buraco pesado com spin para cima ($HH, +$). Já na parte inferior foi considerado o contrário, pois, como pode ser observado nos gráficos (d) e (f), os estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$ têm seus caracteres de spin trocados. A região de superposição de curvas corresponde ao campo crítico B_c em que ocorre a interação e anticruzamento entre A' e B', onde os mesmos são misturados, e seus caracteres de spin são totalmente hibridizados. Nessa região, tanto $|\psi_{A'}\rangle$ quanto $|\psi_{B'}\rangle$ podem ser tomados como ($HH, +$) ou ($HH, -$). Assim, em torno do campo crítico B_c , o spin deixa de ser um bom número quântico.

Para o caso $\theta = 70^\circ$, apresentado na Figura 4.8, observa-se que a interação entre os estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$ é mais intensa que no caso $\theta = 35^\circ$, e ocorre em uma faixa mais ampla de campo magnético. No gráfico (a), nota-se que os estados A' e B' têm, para baixas intensidades B , um comportamento até semelhante aos casos $\theta = 0^\circ$ e $\theta = 35^\circ$, apresentando um afastamento inicial e uma aproximação que se dá até um campo em torno de 12 teslas, a partir do qual os ramos tendem a se afastar, com $|\psi_{B'}\rangle$ assumindo um comportamento quase linear, e com $|\psi_{A'}\rangle$ mudando acentuadamente sua direção. Para compreender melhor este comportamento, faz-se necessário olhar para os caracteres de spin nos gráficos (d) e (f). Observa-se que, até um campo crítico $B_c \approx 8$ T, os caracteres apresentados pelos estados A' e B' são basicamente do tipo ($HH, -$) e ($HH, +$), respectivamente. Isto indica que, até 8 teslas, os caracteres de spin dos estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$ são praticamente os mesmos apresentados por $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$ em $\theta = 0^\circ$ (Figura 4.3), mostrando que o campo magnético inclinado só tem o efeito de hibridizar o spin na banda de valência para campos de alta intensidade, diferentemente do que ocorre no caso da banda de condução, em que para qualquer intensidade de campo magnético o spin dos elétrons tende sempre a se alinhar com

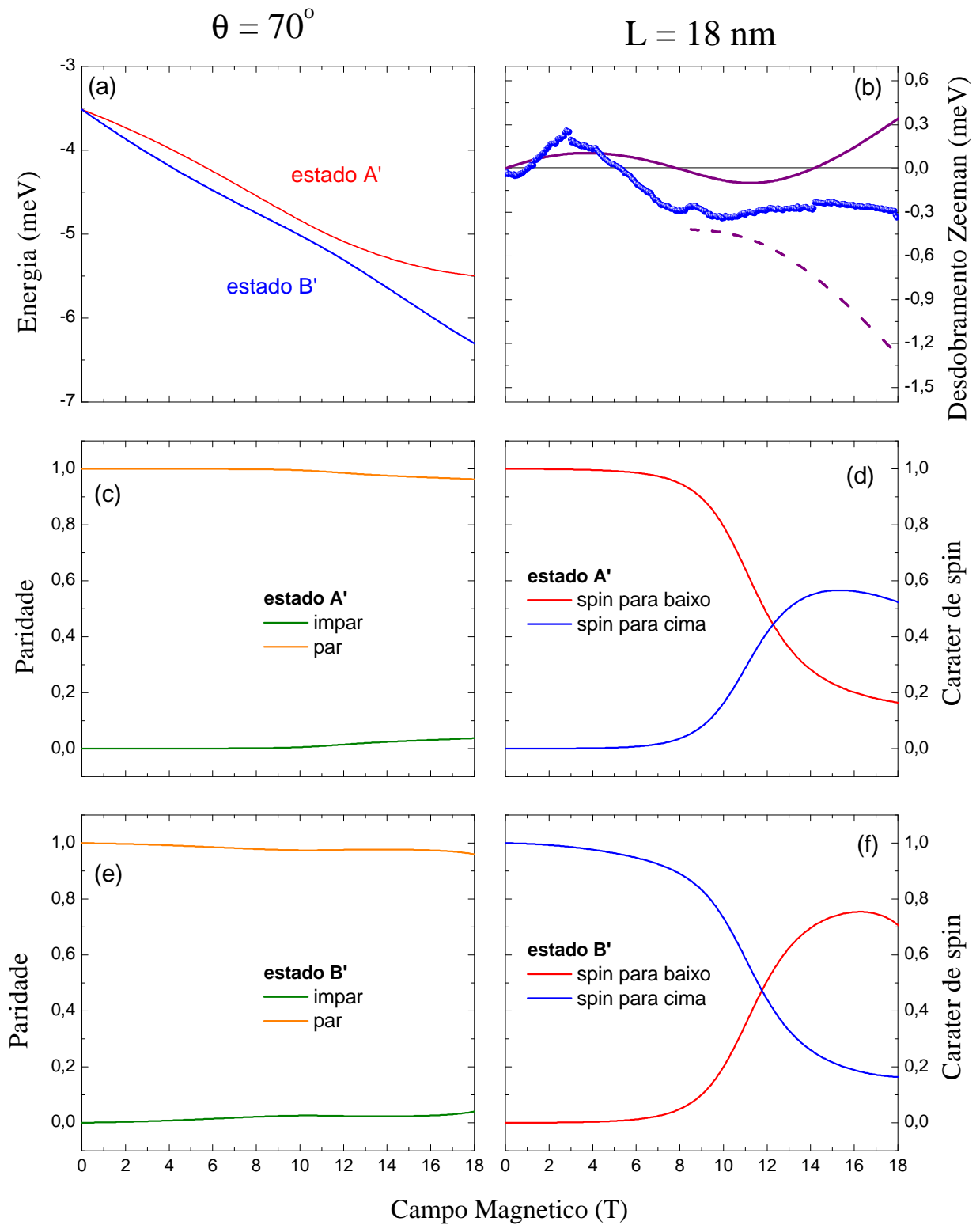


FIGURA 4.8: A partir do caráter de spin dos estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$, observa-se que o acoplamento entre os dois estados em $\theta = 70^\circ$ é mais intenso que em $\theta = 35^\circ$, e seus caracteres de spin tornam-se hibridizados a partir do campo crítico $B_c \approx 8 \text{ T}$, e se mantêm misturados em campos magnéticos maiores. Esta hibridização de caráter faz com que nem A' nem B' possa ser descrito por um spin definido, tornando ambas as curvas de ΔE_Z (linhas sólida e tracejada) válidas em campo magnético alto. São também apresentados dados experimentais de desdobramento Zeeman obtidos da amostra de MQW apresentada no Capítulo 1.

o campo. Para campos $B > 8$ T, passa a ocorrer, para ambos os estados, um processo de hibridização de caráter, cujo ápice ocorre em torno de 12 T, equivalente em (a) à máxima aproximação entre os ramos de A' e B'. Para $B > 12$ T, o caráter de spin do estado $|\psi_{B'}\rangle$ torna-se predominantemente do tipo buraco pesado com spin para baixo, $(HH, -)$, enquanto que o estado $|\psi_{A'}\rangle$ mantém seu caráter de spin hibridizado, com aproximadamente 60% de caráter $(HH, +)$ e 20% de caráter $(HH, -)$, indicando acoplamentos com estados de buraco leve que podem explicar o afastamento apresentado por A' em relação a B'.

Com relação à paridade z dos estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$, observa-se que elas se mantêm majoritariamente par para todos os valores de campo magnético considerados nos gráficos (c) e (e) da Figura 4.8. Já o gráfico (b) apresenta as curvas de desdobramento de spin do par elétron-buraco ΔE_Z , obtidas a partir das energias dos estados A' e B'. A linha sólida foi obtida por meio da equação (4.83), considerando $|\psi_{A'}\rangle$ como estado $(HH, -)$ e $|\psi_{B'}\rangle$ como estado $(HH, +)$, o que é válido para campos menores ou iguais a 8 teslas. No entanto, para $B > 8$ T, como mostram os gráficos (d) e (f), os estados tem seus caracteres de spin hibridizados. Nessa faixa de campo magnético, os estados A' e B' já não podem mais ser caracterizados por um spin definido, ou seja, ambos podem ser tomados como estados do tipo $(HH, +)$ ou $(HH, -)$. Portanto, a partir de $B_c \approx 8$ T, duas curvas de ΔE_z são representadas no gráfico (b), sendo que a linha tracejada foi obtida considerando A' como estado $(HH, +)$ e B' como estado $(HH, -)$. Ainda neste mesmo gráfico são apresentados, como símbolos sólidos em azul, dados experimentais de desdobramento Zeeman obtidos a partir do poço central QW_0 da amostra de MQW representada na Figura 1.2.

Assim como foi realizado na Seção 4.1 para $\theta = 0^\circ$, foram calculadas curvas de desdobramento Zeeman para o ângulo de 70° e poços quânticos de diversas larguras L . A Figura 4.9 apresenta os resultados de ΔE_Z calculados para os estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$. Os símbolos sólidos em cinza representam os dados experimentais de ΔE_Z do poço QW_0 da amostra de poço quântico múltiplo da Figura 1.2. A partir dos gráficos (d) e (f) da Figura 4.8 pode-se constatar que, no caso de campo inclinado em $\theta = 70^\circ$ em um poço quântico de 18 nm, para valores de B acima do valor crítico $B_c \approx 8$ T, o caráter de spin apresenta uma intensa hibridização, sendo que o spin deixa de ser um bom número quântico. O mesmo tipo de hibridização ocorre em poços de outras larguras L , para outros valores B_c . A partir do campo crítico B_c , tanto o estado A' quanto o estado B' podem assumir o papel de estados

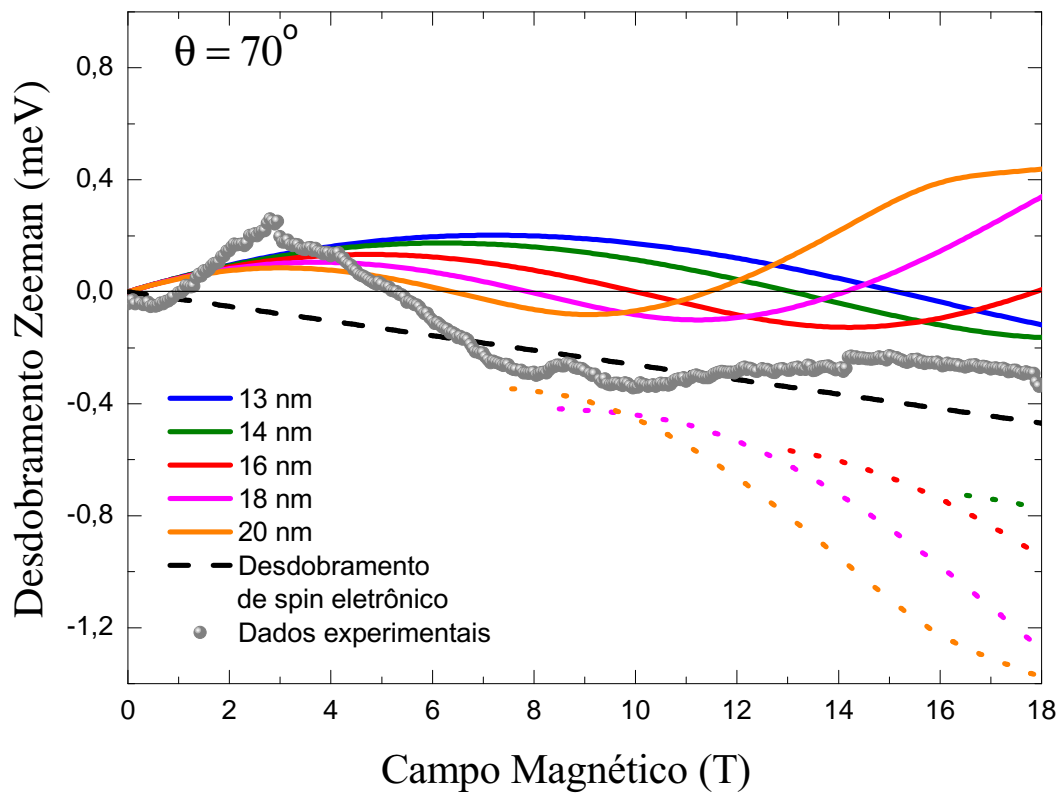


FIGURA 4.9: Curvas de desdobramento Zeeman calculadas a partir dos estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$, para poços quânticos de largura L entre 12 e 20 nm. Os símbolos em cinza representam as medidas experimentais obtidas a partir do poço QW_0 da heteroestrutura representada na Figura 1.2. As curvas sólidas indicam os resultados de ΔE_Z considerando o estado A' como $(HH, -)$ e o estado B' como $(HH, +)$. Já as curvas tracejadas correspondem justamente ao caso oposto, que ocorre em campos magnéticos maiores que o valor crítico B_c , o qual, para cada valor de L , é indicado pelo início das curvas tracejadas coloridas. A linha tracejada em preto denota o desdobramento Zeeman dos elétrons $\Delta\varepsilon_s = g^*\mu_B B$ na banda de condução. A curva de $\Delta\varepsilon_s$ apresenta uma boa concordância com os dados experimentais para o intervalo de campo magnético maior que B_c , no qual os estados da banda de valência têm seus caracteres de spin $(HH, -)$ e $(HH, +)$ fortemente hibridizados.

($HH, +$) ou ($HH, -$). Assim, foram plotadas curvas sólidas e tracejadas para ΔE_Z . As curvas sólidas representam os resultados de desdobramento Zeeman calculados considerando o estado $|\psi_{A'}\rangle$ como estado de buraco pesado como spin para baixo e $|\psi_{B'}\rangle$ como estado de buraco pesado com spin para cima. Já as curvas tracejadas consideram justamente o oposto, em que o estado A'(B') assume o caráter de buraco pesado com spin para cima (baixo), e foram plotadas a partir dos respectivos valores de campo crítico B_c para cada largura L considerada nos cálculos. Considerando que tanto as linhas sólidas quanto as tracejadas podem ser utilizadas para descrever ΔE_Z , é sensato considerar a média dos dois casos, o que resulta justamente na linha preta tracejada, a qual nada mais é do que o desdobramento de spin eletrônico $\Delta\varepsilon_s = g^* \mu_B B$ apresentado no Capítulo 3. Assim, o gráfico da Figura 4.9 pode ser dividido em duas regiões: Em $B < B_c$, onde os estados A' e B' têm caráter de spin bem definido (respectivamente spin para baixo e spin para cima) o desdobramento Zeeman é dado pela contribuição dos estados da banda de condução e da banda de valência, por meio da equação (4.83), e é representado pelas linhas sólidas; no entanto, para $B > B_c$ (região denotada pelas linhas tracejadas coloridas), a hibridização dos caracteres de spin acaba relaxando as regras de seleção envolvidas nas emissões circularmente polarizadas, e ΔE_Z é dado apenas pelo desdobramento Zeeman dos elétrons na banda de condução (linha preta tracejada), o qual, considerando a aproximação de banda de energia parabólica e isotrópica, depende apenas da intensidade do campo magnético e não de sua direção. Observa-se, portanto, uma concordância razoável entre os dados experimentais de ΔE_Z e as linhas sólidas coloridas para campos magnéticos menores que B_c , e entre os dados e a linha tracejada em preto, a qual representa o desdobramento de spin $\Delta\varepsilon_s$ dos elétrons na banda de condução, na região de $B > B_c$.

5. Considerações finais

Este trabalho buscou tratar, de maneira teórica, os efeitos de um campo magnético inclinado sobre os níveis de energia de uma heteroestrutura semicondutora de poço quântico, modelada por um poço de potencial infinito e unidimensional $V(z)$. Entre as motivações para a realização desta pesquisa pode-se citar a escassez de trabalhos envolvendo o tema, além dos resultados experimentais de magnetoluminescência circularmente polarizada, envolvendo uma heteroestrutura de poços quânticos múltiplos na presença de um campo inclinado 70° em relação à direção de crescimento da amostra. A principal ferramenta teórica utilizada foi o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, no qual se baseiam: a aproximação de banda parabólica e o Hamiltoniano de massa efetiva, empregados no cálculo dos níveis de energia do poço na banda de condução; e o Hamiltoniano de Luttinger, obtido a partir do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ por meio da teoria de perturbação quasi-degenerada de Löwdin [38], utilizado na determinação dos níveis de energia do poço quântico da banda de valência.

Inicialmente, a estrutura eletrônica da banda de condução foi obtida no caso mais fundamental, $\theta = 0^\circ$, em que o campo magnético \mathbf{B} aponta sobre a direção de confinamento $\hat{\mathbf{z}}$ do poço quântico. Foi utilizada uma base orbital $\{|\nu\rangle\}$, a qual, juntamente com os autoestados $|+\rangle$ e $|-\rangle$ da matriz de Pauli σ_z , soluciona exatamente a equação de autovalores e autovetores envolvendo o Hamiltoniano de massa efetiva e gera os níveis de energia do sistema. A parte orbital do Hamiltoniano de massa efetiva, H_0 , é diagonal na base $\{|\nu\rangle\}$, a qual é composta dos estados $|n_z\rangle$, os estados ligados em um poço quântico infinito e unidimensional, e dos estados $|n\rangle$, os quais descrevem os níveis de Landau no plano xy . Além disso, o desdobramento de spin na banda de condução, isto é, a diferença de energia entre os estados de spin para baixo e spin para cima, é dada por $\Delta\varepsilon_s = g^* \mu_B B$, não importando a orientação do campo magnético \mathbf{B} .

Posteriormente, foi considerado o caso em que o campo \mathbf{B} forma um ângulo de 90° com a direção $\hat{\mathbf{z}}$. Neste caso, a base $\{|\nu\rangle\}$ foi empregada (mais especificamente os estados $|n_z\rangle$, devido à degenerescência dos níveis de Landau $|n\rangle$ nesta configuração) tanto no método de expansão e diagonalização do Hamiltoniano, como no tratamento por teoria de perturbação não-degenerada de primeira e segunda ordem. Este problema foi também resolvido de maneira analítica, utilizando uma base composta de funções hipergeométricas confluentes [39].

Os resultados obtidos nessa dissertação, demonstraram que a base $|\nu\rangle$, originalmente construída para o caso $\theta = 0^\circ$, também é eficiente para o caso em que $\theta = 90^\circ$. Além disso, a teoria de perturbação, utilizando a base $\{|n_z\rangle\}$, gerou resultados coincidentes com os obtidos pelo método analítico para um limite alto de valores para o campo magnético ($B \approx 45$ T) e espessura do poço quântico ($L = 18$ nm).

Para o caso de campo inclinado, a base $\{|n_z, n\rangle\}$ foi novamente empregada nos métodos: expansão e diagonalização do Hamiltoniano orbital H_0 ; e aplicação de teoria de perturbação não-degenerada de primeira e segunda ordem. Foram analisados os casos de campo inclinado $\theta = 35^\circ$ e $\theta = 70^\circ$, e os resultados obtidos pelos dois métodos mostraram uma boa concordância dentro de um determinado limite de valores de B e L (por exemplo, 20 teslas e aproximadamente 18 nanômetros). No entanto, ao aumentar muito a espessura do poço quântico ou a intensidade do campo magnético aplicado, os resultados de teoria de perturbação em campo inclinado passam a apresentar divergências marcantes. Essas divergências ocorrem devido à utilização da teoria de perturbação para estados não-degenerados em certas situações nas quais os estados se tornam degenerados. Foi mostrado que nestes casos, a teoria de perturbação para estados degenerados pode ser aplicada e tais divergências desaparecem.

Devido ao sucesso na utilização da base $\{|n_z, n\rangle\}$ para resolver o problema do campo magnético inclinado na banda de condução, a mesma base foi utilizada com o intuito de diagonalizar o Hamiltoniano de Luttinger, cujos resultados determinam a estrutura eletrônica da banda de valência do poço quântico sob a influência de um campo magnético inclinado. No caso em que $\theta = 0^\circ$, os primeiros níveis de energia do poço quântico na banda de valência foram denominados estados A e B, ou $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$. Foram calculados o caráter de spin de ambos, e os resultados indicam que $|\psi_A\rangle$ é puramente do tipo buraco pesado com spin para baixo (ou simplesmente $(HH, -)$), enquanto $|\psi_B\rangle$ é majoritariamente $(HH, +)$, mas também é em parte $(LH, +)$ e $(LH, -)$. O interesse em identificar os estados $(HH, +)$ e $(HH, -)$ se deve ao fato dos mesmos dominarem a participação nas transições eletrônicas com emissões circularmente polarizadas a esquerda e a direita, respectivamente. Assim, foi possível calcular o desdobramento de spin do par elétron-buraco ΔE_Z , utilizando a energia dos estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$. Os resultados teóricos de ΔE_Z e os resultados experimentais do desdobramento Zeeman obtidos a partir do poço central QW_0 da amostra de MQW foram comparados. O

cálculo de ΔE_Z foi realizado para $\theta = 0^\circ$ e poços de espessura L de 10 a 18 nanômetros, e constatou-se uma melhor concordância entre teoria e experimento para um poço quântico de 13 nm.

Para campo magnético inclinado, acoplamentos não ocorrentes em $\theta = 0^\circ$ fazem com que a forma dos ramos de energia se modifiquem. Os estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$ correspondem aos dois níveis de maior energia na banda de valência e os resultados obtidos mostram que há acoplamento entre estes estados e que esta interação é mais fraca em $\theta = 35^\circ$ do que em $\theta = 70^\circ$. Além disso, para $\theta = 70^\circ$ e um poço quântico de largura $L = 18$ nm, o caráter de spin dos estados $|\psi_{A'}\rangle$ e $|\psi_{B'}\rangle$ torna-se hibridizado em campos magnéticos $B > 8$ T. Neste caso, o spin dos estados da banda de valência se torna ambíguo, o que faz com que o desdobramento Zeeman seja dado somente pela contribuição dos elétrons. Dessa maneira, os resultados experimentais podem ser compreendidos considerando-se um campo magnético crítico B_c que define duas regiões. Na primeira região ($B < B_c$), ΔE_Z é dado pela contribuição das bandas de condução e de valência. No entanto, para $B > B_c$, ΔE_Z é descrito somente pela contribuição da banda de condução. Com essa descrição teórica, os dados experimentais $\theta = 70^\circ$ foram constatados com os resultados teóricos e observou-se uma concordância relativamente boa entre teoria e experimento. Tal descrição teórica juntamente com os resultados experimentais resultaram em um artigo científico [30]. Além disso, pretende-se elaborar um outro artigo científico que contenha um estudo sistemático dos efeitos do campo magnético inclinado na banda de condução. Futuramente, pode-se ainda estender o estudo desenvolvido nessa dissertação a outros sistemas, tais como: poço quântico duplo, fios quânticos e pontos quânticos. Espera-se também que este trabalho estimule experimentos sistemáticos nestes sistemas considerando os efeitos da orientação do campo magnético.

Bibliografia

- [1] F. F. Fang, P. J. Stiles, *Effects of a Tilted Magnetic Field on a Two-Dimensional Electron Gas*, Phys. Rev. **174**, 823 (1968).
- [2] J. Luo, H. Monekata, F. F. Fang, P. J. Stiles, *Observation of the zero-field spin splitting of the ground electron subband in GaAs-InAs-GaAs quantum wells*, Phys. Rev. B **38**, 10142 (1988).
- [3] M. Shayegan, T. Sajoto, J. Jo, M. Santos, H. D. Drew, *Electron states of a wide quantum well in a tilted magnetic field*, Phys. Rev. B **40**, 3476 (1989).
- [4] W. Sheng, P. Haurybak, *Spin polarization in self-assembled quantum dots*, Phys. Rev. B **73**, 125331 (2006).
- [5] Pochung Chen, C. Piermarocchi, L. J. Sham, D. Gammon, D. G. Steel, *Theory of Quantum Optical Control of Single Spin in a Quantum Dot*, Phys. Rev. B **69**, 075320 (2004).
- [6] J. A. Gupta, D. D. Awschalom, X. Peng, A. P. Alivisatos, *Spin coherence in quantum dots*, Phys. Rev. B **59**, R10 421 (1999).
- [7] D. Loss, D. P. Di Vincenzo, *Quantum computation with quantum dots*, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
- [8] S. Tyen, P. A. Shields, R. J. Nicholas, F. Tsai, C. Lee, *Magneto-Photoluminescence Study of InGaAs/GaAs Quantum Wells and Quantum Dots Grown on (111)B GaAs Substrate*, Jpn. J. Appl. Phys. **39**, 3286 (2000)
- [9] *Pensando o Futuro. O desenvolvimento da física e sua inserção na vida social e econômica do país*, Ed. Sociedade Brasileira de Física (2005).

-
- [10] Lianhe Li, Li Chen, Jingxuan Zhu, J. Freeman, P. Dean, A. Valavanis, A. G. Davies, and E. H. Linfield, *Terahertz quantum cascade lasers with >1W output powers*, Electron. Lett. **50**, 309 (2014)
- [11] T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern, *Electronic properties of two-dimensional systems*, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982)
- [12] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Halsted Press, 1988)
- [13] A. Y. Cho, *Advances in molecular beam epitaxy (MBE)*, J. Cryst. Growth **111**, 1-13 (1991)
- [14] D. A. B. Miller, *Optical Physics of Quantum Wells*. Ver: www-ee.stanford.edu/~dabm/181.pdf
- [15] M. R. de Souza Dias, *Estudo de efeitos quânticos nas propriedades eletrônicas de nanofios semicondutores*, Master Dissertation, UFSCAR (2010)
- [16] R. Bratschitsch, A. Leitenstorfer, *Quantum dots: Artificial atoms for quantum optics*, Nat. Mater. **5**, 855 (2006)
- [17] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wojs, *Quantum Dots* (Springer, Berlin, 1998).
- [18] D. Bimberg, M. Grundmann, N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures* (Wiley, London, 1998).
- [19] M. D. Teodoro, *Efeito Aharonov-Bohm em Partículas Neutras*, Ph.D. Thesis, UFSCAR (2011)
- [20] A. Zoubir, *Raman Imaging: Techniques and Applications*, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2012).
- [21] B. Imangholi, M. P. Hasselbeck, M. Sheik-Bahae, *Absorption spectra of wide-gap semiconductors in their transparency region*, Opt. Commun. **227**, 337-341 (2003).
- [22] G. Dresselhaus, A. F. Kip, C. Kittel, *Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals*, Phys. Rev. **98**, 368 (1955)

- [23] G. D. Gilliland, *Photoluminescence spectroscopy of crystalline semiconductors*, Mater. Sci. Eng. R18, 99-400 (1997)
- [24] R. C. Miller, D. A. Kleinman, *Excitons in GaAs Quantum Wells*, J. Lumin. **30**, 520 (1985)
- [25] D. M. Whittaker, A. J. Shields, *Theory of X^- at high magnetic fields*, Phys. Rev. B **56**, 15185 (1997)
- [26] R. K uchler, P. Hiergeist, G. Abstreiter, J. P. Reithmaier, H. Riechert, R. L osch, *Magneto-Luminescence and Magneto-Luminescence Excitation Spectroscopy in Strained Layer Heterostructures*, Springer Series in Solid-State Sciences **101**, 1514 (1992)
- [27] J. C. Maan, *Combined Electric and Magnetic Field Effects in Semiconductor Heterostructures*, Springer Series in Solid-State Sciences **53**, 183 (1984)
- [28] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer Tracts in Modern Physics, (Springer, Berlin, 2003), Vol. 191.
- [29] N. Miura, Y. H. Matsuda, K. Uchida, H. Arimoto, *Magneto-optical study of semiconductor nanostructures in high magnetic fields*, J. Phys.: Condens. Matter **11**, 5917 (1999)
- [30] L. Fernandes dos Santos, L. K. Castelano, J. X. Padilha, Y. Pusep, G. E. Marques, D. Smirnov, A. K. Bakarov, A. I. Toropov, V. Lopez-Richard, *Excitonic spin splitting in quantum wells with tilted magnetic field* (Submetido para publica  o).
- [31] L. Fernandes dos Santos, Yu. A. Pusep, A. K. Bakarov, A. I. Toropov, *Valence band tail states in disordered superlattices embedded in wide parabolic AlGaAs well*, J. Appl. Phys. **111**, 123523 (2012)
- [32] J. M. Luttinger, *Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory*, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956)
- [33] H. Haug, S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, 5-th ed., World Scientific Co. Pte. Ltd. (2002)
- [34] F. Bloch, * ber die Quantenmechanik der Elektron in Kristallgittern*, (1928)

-
- [35] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Harcourt College Publishers (1976)
- [36] E. O. Kane, *Band structure of indium antimonide*, J. Phys. Chem. Solids **1**, 249 (1957)
- [37] A. Elçi, E. D. Jones, *Some consequences of the closure of the momentum Bloch functions*, Phys. Rev. B **34**, 8611 (1986)
- [38] P. Löwdin, *A Note on the Quantum-Mechanical Perturbation Theory*, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951)
- [39] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover Publications, New York (1972)
- [40] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Quantum Mechanics*, Volume 1, WILEY-VHC (1992)
- [41] W. W. Chow, S. W. Koch, *Semiconductor-laser Fundamentals: Physics of the Gain Materials* (Springer, Berlin, 1999)
- [42] L. K. Castelano, D. F. Cesar, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, O. D. D. Couto, F. Iikawa, R. Hey, and P. V. Santos, *Zeeman splitting and spin dynamics tuning by exciton charging in two-dimensional systems*, Phys. Rev. B **84**, 205332 (2011)
- [43] T. E. Ostromeck, *Evaluation of matrix elements of the 8×8 $k \cdot p$ Hamiltonian with k -dependent spin-orbit contributions for the zinc-blend structure of GaAs.*, Phys. Rev. B **54**, 14467 (1996)
- [44] K. Hess et al., *Physics of Semiconductors: Proceeding of the 13th International Conference*, North-Holland, New York (1976)