

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

# **Estudo de efeitos quânticos nas propriedades eletrônicas de nanofios semicondutores**

Mariama Rebello de Sousa Dias

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. Victor Lopez Richard  
Co-orientador: Dr. Leonardo Villegas Lelovsky

São Carlos, Fevereiro 2010

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

S725ee

Sousa-Dias, Mariama Rebello de.

Estudo de efeitos quânticos nas propriedades eletrônicas de nanofios semicondutores / Mariama Rebello de Sousa Dias. -- São Carlos : UFSCar, 2010.  
77 f.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2010.

1. Matéria condensada (Propriedades óticas). 2. Nanofios semicondutores. 3. Método K.p. 4. Interação spin-órbita. I. Título.

CDD: 530.41 (20ª)

**Mariama Rebello de Sousa Dias**

Dissertação de Mestrado submetida à Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal de São Carlos, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

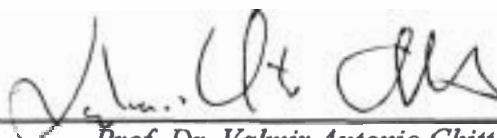
**Aprovado em: 02 de março de 2010**

**BANCA EXAMINADORA**



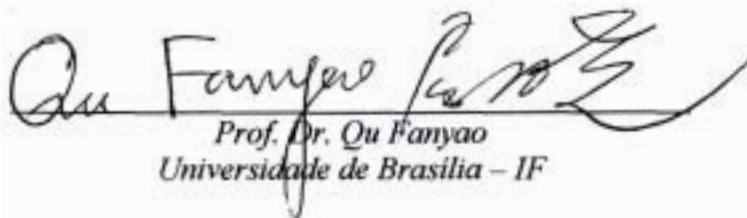
---

*Prof. Dr. Victor Lopez Richard (Orientador)  
Universidade Federal de São Carlos – DF*



---

*Prof. Dr. Valmir Antonio Chitta  
Universidade de São Paulo - IFUSP*



---

*Prof. Dr. Qu Fanyao  
Universidade de Brasília – IF*

Dedico esse trabalho aos meus pais,  
Régis e Regina, ao meu irmão  
Matheus e à minha avó Bárbara.

## AGRADECIMENTOS

Ao professor Victor pela oportunidade, orientação, ensinamentos, motivação e amizade que permitiu a realização desse trabalho e permitirá sua continuação.

Ao professor Leonardo pelos ensinamentos e discussões que proporcionaram meu aprendizado.

Ao professor Gilmar pelas correções e ensinamentos que ajudaram a finalizar essa dissertação.

Ao professor Trallero pelas saudáveis discussões que proporcionaram meu aprendizado no assunto.

Aos meus pais, Régis e Regina e ao meu irmão Matheus que sempre me apoiaram, me acompanharam e me deram suporte em todas as decisões e dificuldades enfrentadas. Além de compartilharem diariamente minhas vitórias e alegrias.

À minha avó Bárbara que, além de ser uma pessoa incrível, sempre esteve presente nas minhas decisões e me apoiou em todas elas.

Às minhas amigas e companheiras de casa: Aline, Ana Carolina, Giuseppina, Juliana e Milena pela motivação, paciência, compreensão e companheirismo.

Ao Gustavo que me incentivou, me apoiou e me aturou nessa jornada.

Aos meus queridos amigos de sala: Aníbal, Ednilson, Daniel e Marcio que sempre estiveram ao meu lado me apoiando e me aturando em todas as horas difíceis.

Aos meus queridos amigos de São Carlos: Rodrigo, Ulysses, Rafael T., Raul, Eduardo, Gabriela, Driele, Rafael P., Getúlio, Otávio, Luciano, Daniel Zini, Daniel Scivolletto, Felipe e Eduardo, que sempre estiveram ao meu lado nesses dois anos.

Aos meus amigos de Pouso Alegre, que mesmo distântes, permaneceram presentes.

Aos professores e funcionários do Departamento de Física que contribuíram e possibilitaram minha formação acadêmica.

Enfim, a todos meus familiares, amigos e pessoas queridas que por motivos diversos não estiveram presentes diariamente na minha vida, mas contribuíram para a formação da pessoa que sou hoje.

## RESUMO

Os estudos recentes, tanto da síntese quanto da caracterização, de sistemas de nanofios semicondutores se tornaram atraentes devido sua importância tecnológica na construção de fotodetectores, dispositivos opto-eletrônicos e seu uso potencial no processamento de informação quântica e aplicações fotônicas. O presente trabalho propõe a caracterização de propriedades de nanofios semicondutores. Iniciou-se o estudo nos marcos da eletrodinâmica clássica, no qual o espalhamento da luz foi contrastado com resultados experimentais de fotoluminescência encontrados na literatura. Os modelos clássicos aparecem na literatura sem uma discussão procedente e seus marcos de aplicação muitas vezes não são compatíveis com a fenomenologia experimental analisada. Assim, nos foi possível introduzir elementos quânticos para elucidarmos uma fenomenologia coerente com os resultados obtidos pelos nossos colaboradores experimentais. Através do método **k.p**, em particular pelo Hamiltoniano de Luttinger, analisamos os efeitos do confinamento biaxial e de “*strain*” na banda de valência de nanofios semicondutores. Complementando a abordagem de propriedades óticas, finalizamos esta dissertação analisando os efeitos da interação spin-órbita na banda de condução, uma vez que os resultados analíticos, satisfatoriamente obtidos para o estudo da banda de valência, poderiam ser utilizados nesse novo cálculo.

## ABSTRACT

The growth and characterization of semiconductor nanowires systems have attracted increasing interest due to their potential technological application, like, photo-detectors, opto-electronic devices and their promising features for quantum information processing and photonic applications. The goal of this work is the characterization of properties of semiconductor nanowires. The study was started within the framework of classical electrodynamics and this model for light-scattering was contrasted with experimental results from the photoluminescence. This classical model has been published in the literature without a concrete discussion and its application range is often not compatible with the analyzed experimental phenomenology. Thus, we have introduced quantum elements to elucidate a consistent phenomenology with the results obtained in the experiments. Through the **k.p** method, using in particular the Luttinger Hamiltonian, the effects of biaxial confinement and strain were analyzed in the valence band of semiconductor nanowires. This study was complemented with the description of optical properties. For the conduction band states, we were able to introduce the spin-orbit interaction since analytical results, successfully obtained from the simulation of the valence band, could be directly used in this new calculation.

## SUMÁRIO

1. Introdução . . . . .	2
2. O espalhamento elástico da luz em nanofios: modelo clássico . . . . .	7
2.1 Cálculo dos campos elétricos em um cilindro dielétrico . . . . .	9
2.1.1 Cálculo do Laplaciano em coordenadas cilíndricas . . . . .	10
2.1.2 Cálculo do campo elétrico para um campo incidente perpendicular ( $\mathbf{E}^{\perp}$ ) ao cilindro . . . . .	17
2.2 Espalhamento de luz por um cilindro pequeno . . . . .	23
3. Estrutura eletrônica de nanofios: efeitos de quantização . . . . .	35
3.1 Fundamentos do modelo $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ : Modelo de Luttinger. . . . .	37
3.2 Cálculos dos elementos de matriz. . . . .	43
3.3 Introdução dos efeitos de “ <i>strain</i> ”. . . . .	46
3.4 Cálculo efetivo da banda de valência do nanofio de <i>InP</i> . . . . .	47
3.5 Regras de seleção da emissão de luz em nanofios semicondutores . . . . .	50
4. Efeitos de spin em nanofios: interação spin-órbita . . . . .	60
4.1 Natureza da interação spin-órbita . . . . .	60
4.1.1 Acoplamento spin-órbita a partir da equação de Dirac . . . . .	63
4.2 Cálculos dos elementos cúbicos de matriz. . . . .	65
4.3 Resultados para os níveis de energia e a polarização de spin do estado fundamental de um nanofio. . . . .	67
5. Considerações finais . . . . .	70



## 1. INTRODUÇÃO

Os temas de pesquisa abordados nesta dissertação de Mestrado visam não somente a obtenção de resultados originais em problemas relacionados à caracterização das propriedades eletrônicas e óticas de nanofios semicondutores, mas também a familiarização com ferramentas teóricas fundamentais para o desenvolvimento de estudos em diversas áreas relacionadas com a Matéria Condensada e seus vínculos com simulações e previsões de resultados experimentais. Assim, dois eixos temáticos foram definidos para este trabalho. O primeiro refere-se ao estudo de fundamentos da Física Teórica dos Sólidos e o segundo à aplicação de Métodos Matemáticos utilizados na abordagem de problemas de cálculo de estrutura eletrônica. Também é importante destacar que, sendo esta proposta um estudo aplicado, usamos, como contrapartida experimental, resultados da caracterização por fotoluminescência (PL) de nanofios semicondutores reportados na literatura e dados fornecidos por colaboradores experimentais deste projeto de pesquisa.

O objetivo fundamental deste trabalho é a **análise de efeitos quânticos nas propriedades eletrônicas de nanofios semicondutores**. Estes sistemas nanoscópicos possuem importância devido as suas diversas aplicações tecnológicas na construção de fotodetectores [1], dispositivos opto-eletrônicos e seu uso potencial no processamento de informação quântica e aplicações fotônicas [2, 3].

O estudo óptico de nanoestruturas do tipo fio quântico baseados em materiais semicondutores tiveram sua origem a partir da sua síntese por métodos litográficos e epitaxiais [4, 5, 6, 7, 8]. Esses primeiros modelos diferem profundamente dos chamados nanofios semicondutores atuais. A síntese desses, foi primeiramente descrita e estudada nas Refs. [2, 9, 10]. Estas estruturas caracterizam-se por serem fios independentes do meio semicondutor base, ou seja, são sistemas que apresentam um forte potencial de confinamento e possuem uma diferença considerável de sua constante dielétrica em relação ao meio. Será

este tipo de sistema nanoscópico o objeto de estudo do presente trabalho.

Para que o objetivo principal desta monografia fosse alcançado, três frentes de trabalho foram propostas. Em um primeiro momento, como destacado no capítulo 2 desta dissertação, foi feito um estudo das fronteiras clássicas da resposta ótica de nanofios dielétricos, motivados por resultados e discussões encontrados na literatura [1, 11, 7]. Estes modelos são utilizados para caracterizar propriedades óticas dos nanofios e permitem definir sob quais condições os efeitos quânticos podem ser desprezados e quão importantes eles são para interpretar certos fenômenos observados experimentalmente.

Sob uma ótica clássica, o resultado anisotrópico reportado no processo de espalhamento da luz em nanofios tem sua origem nas diferentes constantes dielétricas entre o meio e o material [1, 11, 7]. Assim, aproximando o nanofio semiconductor para um cilindro infinito calculamos os campos elétricos internos em duas situações: para um campo externo homogêneo incidente perpendicularmente à direção longitudinal do cilindro e para um outro incidente paralelamente ao eixo. Essa consideração, no qual o sistema está imerso em um campo externo homogêneo, aplica-se ao sistema quando o comprimento de onda da luz incidente é muito maior que as dimensões do nanofio.

O resultado obtido com este estudo indica que a condição de excitação paralela deve ser mais intensa em relação à perpendicular. Usando a aproximação de dipolo [12] elétrico, relacionamos diretamente a intensidade da luz espalhada com o campo elétrico interno ao cilindro. Analisamos detalhadamente as intensidades das possíveis configurações de polarização linear da luz, tanto no processo de excitação quanto no de emissão óticas. Esse resultado deixou evidente que não existe possibilidade de obtermos resposta em uma certa direção de polarização elétrica quando houver excitação somente numa direção perpendicular àquela. Esse resultado entra em contradição com os reportados na Ref. [1], que detecta resposta ótica em ambas direções usando apenas uma excitação ótica com polarização fixa e resulta um tópico de discussão desta monografia.

Ainda, ao considerarmos uma condição de excitação depolarizada, comprovamos que a condição de excitação com a polarização da luz paralela à direção longitudinal do nanofio torna-se dominante no processo de emissão. Essa mesma condição nos possibilitou a

análise dos fatores de depolarização e do grau de polarização, ambos máximos para um ângulo de detecção normal à direção longitudinal do cilindro.

Uma outra divergência encontrada em estudos reportados na literatura refere-se às frequências das luzes incidentes e emitidas nos processos de excitação e detecção. Na abordagem clássica usual [1, 11, 7], ambas frequências devem ser consideradas iguais, caracterizando processos elásticos. Porém, nos experimentos reportados, usando técnicas de PL, a luz emitida possui uma frequência menor que a incidente, caracterizando um processo inelástico.

Os resultados reportados por nossos colaboradores experimentais (Fig. 2.1), conjuntamente com estas contradições, reforçam a idéia de utilizarmos uma abordagem quântica para elucidar a origem dos fenômenos de anisotropias óticas detectadas. Assim, introduzimos modelos para o cálculo da estrutura eletrônica de nanofios de *InP*, utilizando o método  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ , apresentados no capítulo 3. No caso particular do cálculo de estrutura eletrônica da banda de valência utilizamos o Hamiltoniano de Luttinger [14], que vai além da aproximação parabólica. Neste tratamento, acrescentamos as contribuições associadas aos efeitos de *strain* [15, 16]. Estas contribuições, além de terem sido detectadas experimentalmente, são importantes e fundamentais para a explicação fenomenológica da recombinação ótica observada nos espectros de emissão (PL) reportados por nossos colaboradores experimentais. A presença e a capacidade de manipulação desses efeitos torna possível a alteração das propriedades eletrônicas dessas nanoestruturas. Estas possibilidades de controle externo são extremamente interessantes para potenciais aplicações como construção de dispositivos nanoscópicos [17].

No cálculo dos elementos de matriz deste Hamiltoniano, obtemos soluções analíticas; isso permite determinar regras de seleções para transições entre estados indexados com o número quântico principal angular. Através da análise das simetrias existentes entre os estados foi possível subdividir o espaço de Hilbert em subespaços ortogonais, o que torna o processo de diagonalização muito mais eficiente.

Ainda nesse mesmo capítulo, calculamos as regras de seleção para a emissão de luz em nanofios semicondutores, uma vez suposta a relação direta da anisotropia detectada com

o elemento de matriz de dipolo envolvido nas transições óticas [18, 6, 5]. Os resultados obtidos comprovaram a existência de efeitos de hibridização do carácter dos estados da banda de valência o que está associado à anisotropia da polarização da luz no processo de emissão para uma polarização de excitação fixa, ou seja, foi possível descrevermos a resposta anisotrópica da PL em relação às diferentes polarizações da excitação e da emissão.

Utilizando praticamente os resultados analíticos dos elementos de matriz para a montagem do Hamiltoniano da banda de valência foi possível, com complementações, estendermos os estudos da estrutura eletrônica incluindo os efeitos da interação spin-órbita (ISO) na banda de condução desses sistemas, apresentados no capítulo 4.

Estudos teóricos anteriores apresentam uma discussão detalhada sobre os efeitos da ISO em cristais com estruturas tipo blenda de zinco [19, 20, 21]. Para os sistemas do tipo nanofio semiconductor, existem trabalhos que realizam uma análise detalhada da sua estrutura eletrônica para diferentes geometrias, incluindo todos os termos de ISO do tipo Dresselhaus no Hamiltoniano para a banda de condução [21, 22, 23].

A aplicação destes modelos permitem avaliar quão relevantes são os diferentes parâmetros estruturais na conformação da estrutura eletrônicas: dimensionalidade [24, 25, 26], a interação Coulombiana entre elétrons [27] e ainda o tamanho e a forma [28, 29] do sistema. A aproximação parabólica para a banda de condução foi considerada apropriada para descrevermos sua estrutura eletrônica. Pois, foram usados parâmetros de semicondutores de “*gap*” largo. O efeito da ISO foi acrescentado através dos termos de Dresselhaus [19, 20, 21, 30] até terceira ordem. Em estudos referentes a pontos quânticos [31] e poços quânticos [30], usualmente considera-se apenas as contribuições dos termos  $\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{z}}$ -linear e  $\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{z}}^2$ -quadrático com relação ao momento. Em alguns casos, quando o valor médio de  $\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{z}}$  é nulo, considera-se apenas a influência dos termos lineares das componentes do momento no plano  $(\hat{k}_x, \hat{k}_y)$  [21, 24, 25, 26, 32, 33]. Porém, os termos cúbicos em  $k$  devem ser inseridos no Hamiltoniano, quando esse apresenta valores grandes dos parâmetros da ISO.

Assim, foi possível construirmos o Hamiltoniano completo dos estados da banda de

---

condução, inserir os termos de ISO Dresselhaus até terceira ordem e analisarmos os efeitos dessa interação nas autoenergias do sistema, o que resultou na quebra da degenerescência de alguns estados. Além disso, foi possível descrevermos a condição da polarização de spin desses sistemas. Geralmente tais efeitos são obtidos a partir da presença de campos magnéticos externos. Porém, a polarização do estado fundamental foi obtida exclusivamente devido à redução de simetria do sistema. [34]

Os resultados destes trabalhos foram utilizados nas seguintes publicações:

L. Villegas-Lelovsky, C. Trallero-Giner, M. Rebello Sousa Dias, V. Lopez-Richard and G. E. Marques, *Spin polarization in quantum wires: Influence of Dresselhaus spin-orbit interaction and cross-section effects*, **Physical Review B** **79**, 15530 (2009).

V. Lopez-Richard, J. C. González, F. M. Matinaga, C. Trallero-Giner, E. Ribeiro, M. Rebello Sousa Dias, L. Villegas-Lelovsky, and G. E. Marques, *Markovian and Non-Markovian Light-Emission Channels in Strained Quantum Wires*, **Nano Letters** **9**, 3129 (2009).

## 2. O ESPALHAMENTO ELÁSTICO DA LUZ EM NANOFIOS: MODELO CLÁSSICO

O primeiro problema a ser discutido neste trabalho está relacionado com as propriedades da resposta ótica de nanofios semicondutores que podem ser compreendidas e simuladas dentro dos marcos da eletrodinâmica clássica. Desta maneira poderemos justificar posteriormente em quais momentos será essencial realizar uma abordagem quântica. Para isto, usamos como elementos motivadores, os resultados experimentais disponíveis na literatura [1, 11, 7] e as análises fenomenológicas baseadas em conceitos clássicos, apresentadas pelos autores destes trabalhos.

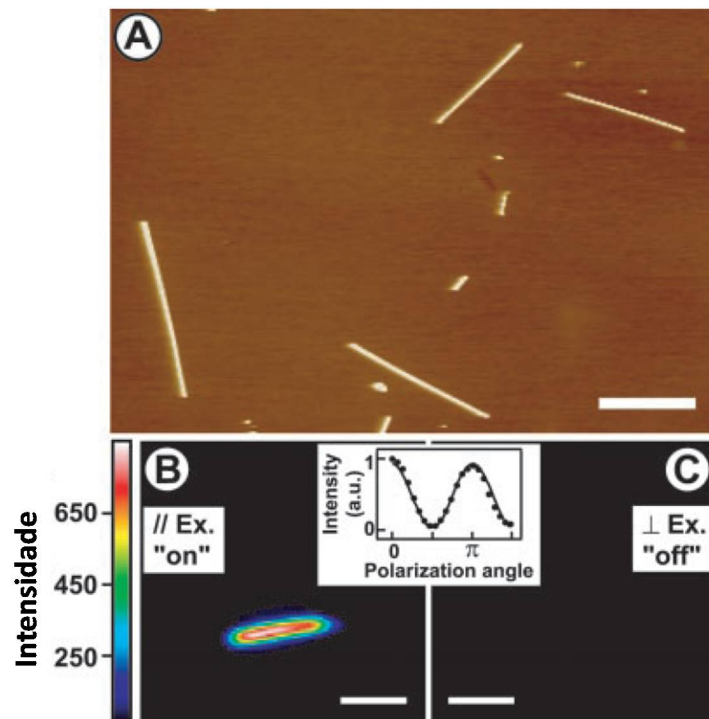


Fig. 2.1: (A) Imagem de microscopia de força atômica dos nanofios de *InP*. (B) Imagem de PL de um único nanofio de *InP* excitado com um laser com polarização ótica ao longo do seu eixo. (C) Imagem de PL do mesmo fio em (B) com excitação linear polarizada perpendicular ao eixo. [1]

Como exemplo de nanofios sintetizados a base de semicondutores, apresentamos na

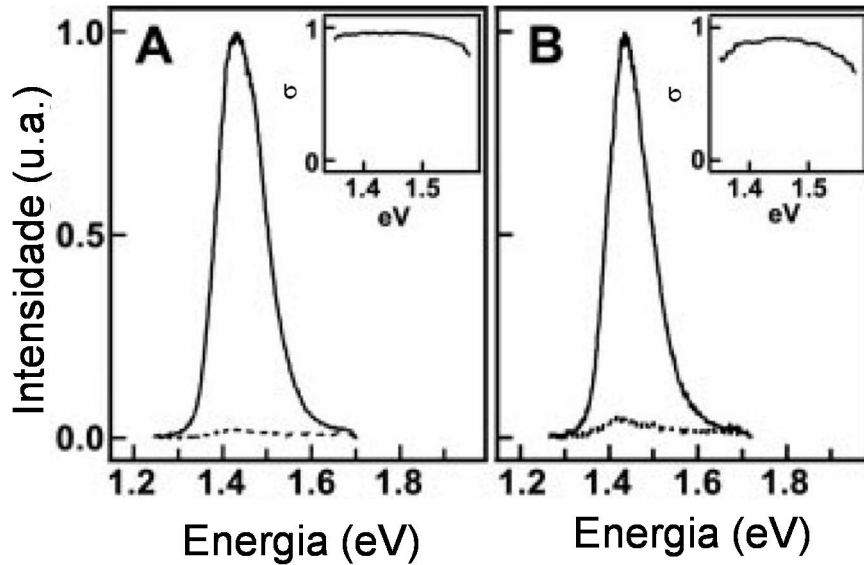


Fig. 2.2: Espectros de excitação e emissão polarizados. (A) Espectro de excitação do nanofio, com o laser incidente polarizado paralelamente (linha contínua) e perpendicularmente (linha tracejada) ao eixo do fio. No gráfico inserido nessa figura está o grau de polarização em função da energia. (B) Espectro de emissão do mesmo fio que (A) com excitação fixa paralela ao eixo do fio. Novamente há um gráfico inserido com o grau de polarização. [1]

Fig. 2.1(A) as imagens de microscopia de força atômica (AFM) extraídas da Ref. [1]. As imagens de PL de um nanofio de *InP* obtidas ao aplicar um laser polarizado paralelamente ao seu eixo, na Fig. 2.1(B), ou perpendicularmente a ele, na Fig. 2.1(C) revelam uma grande anisotropia do processo de espalhamento de luz. A emissão de PL aparece e praticamente desaparece ao girar a polarização de excitação entre a direção paralela ao eixo do fio e a perpendicular. O gráfico inserido entre as Figuras 2.1(B) e 2.1(C) mostra uma dependência do tipo  $\cos^2(\theta)$  da intensidade de emissão em função do ângulo de polarização do laser de excitação.

Esta anisotropia na resposta ótica dos nanofios esta ilustrada também no gráfico da Fig. 2.2(A), onde o espectro de PL aparece para duas condições diferentes de excitação (com polarização paralela ou perpendicular ao fio) e na Fig. 2.2(B), na qual há uma condição de excitação fixa, mostra-se também quanto a emissão do fio é fortemente polarizada. Os gráficos referentes ao grau de polarização, definido como:  $\sigma = (I^{\parallel} - I^{\perp}) / (I^{\parallel} + I^{\perp})$ , foram inseridos nas figuras (Fig. 2.2(A) e (B)), respectivamente, e mostram o valor experimental médio de  $\sigma = 0.91 \pm 0.07$  [1], tanto para a absorção quanto para a emissão. Feitas estas constatações experimentais, o primeiro passo será abordar

o problema do espalhamento da luz em nanofios usando premissas da eletrodinâmica clássica.

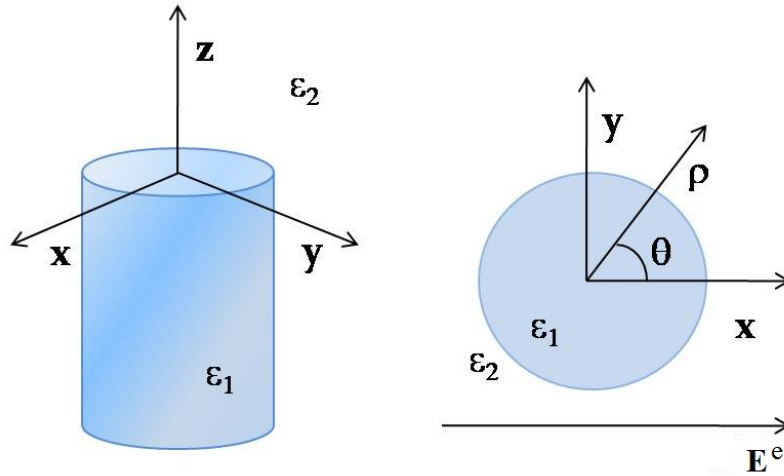


Fig. 2.3: Esquema de um cilindro dielétrico na presença de um campo elétrico externo homogêneo.

### 2.1 Cálculo dos campos elétricos em um cilindro dielétrico

O estudo clássico das propriedades de um cilindro dielétrico, resulta um problema enriquecedor e um desafio matemático importante para a execução de tarefas teóricas mais avançadas posteriormente. Este preâmbulo permitirá compreender com clareza os limites deste tipo de análise quando confrontados com as evidências experimentais que acabamos de mostrar.

Para ondas espalhadas com comprimentos de ondas maiores do que as dimensões do nanofio, como é o caso da PL reportada nos experimentos, podemos considerar que o sistema esteja imerso no campo elétrico homogêneo da luz incidente. Para isto consideramos o fio semiconductor, como um cilindro dielétrico da Fig. 2.3, com permissividade  $\epsilon_1$  e envolto pelo meio com permissividade  $\epsilon_2$ , inserido num campo externo homogêneo  $\mathbf{E}^e$ . O primeiro passo consistirá em calcular o campo elétrico dentro do cilindro que irá caracterizar posteriormente a intensidade da luz espalhada.

Quando aplicamos um campo elétrico paralelamente ao eixo do cilindro ( $\mathbf{E}^{\text{el}}$ ), o problema apresenta simetrias radial e azimutal e, assim, o campo elétrico dentro do cilindro dielétrico é da mesma ordem de grandeza e orientado na mesma direção e sentido que o



campo externo aplicado

$$\mathbf{E}_1^{\parallel} = \mathbf{E}_{\infty}^{\parallel}. \quad (2.1)$$

No caso de um campo  $\mathbf{E}^e$  aplicado perpendicularmente ao cilindro ( $\mathbf{E}^{e\perp}$ ), como ilustrado na Fig. 2.3, o problema é mais complexo.

Para simplificar matematicamente o tratamento deste problema resolveremos a equação de Laplace em coordenadas cilíndricas e, a partir dessa solução, utilizaremos as condições de contorno necessárias para achar os valores tanto do potencial elétrico quanto do campo elétrico.[12, 36, 37]

### 2.1.1 Cálculo do Laplaciano em coordenadas cilíndricas

A equação de Laplace é um caso particular da equação de Poisson; essa, por sua vez, é obtida através da combinação entre a primeira lei de Maxweel da Eletrostática

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_{dv}}{\varepsilon_0}, \quad (2.2)$$

onde  $\rho_{dv}$  é a densidade de carga volumétrica e  $\varepsilon_0$  é a constante dielétrica do vácuo, com a equação

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi \quad (2.3)$$

que relaciona o campo elétrico com o gradiente negativo do potencial elétrico [36] ou seja,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{\rho_{dv}}{\varepsilon_0} \\ \nabla \cdot (-\nabla\phi) &= \frac{\rho_{dv}}{\varepsilon_0} \\ \nabla^2\phi &= -\frac{\rho_{dv}}{\varepsilon_0} \end{aligned} \quad (2.4)$$

A equação de Poisson (equação 2.4) estabelece uma relação entre o potencial elétrico e uma certa distribuição de carga  $\rho_{dv}$  que gera este campo, porém em certos problemas a densidade de carga pode ser nula, ou seja, as cargas geradoras desse potencial estão situadas fora da região de interesse do cálculo. Levando em consideração esse caso particular,

no qual  $\rho_{av} = 0$ , obtemos a equação de Laplace (equação (2.5)).

$$\nabla^2 \phi = 0. \quad (2.5)$$

Como o nosso problema possui simetria cilíndrica, o próximo passo é determinar a equação de Laplace em coordenadas cilíndricas. Utilizando o Laplaciano nessas coordenadas, temos que

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \phi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} \right) + \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right) = 0.$$

Supondo então que a solução seja composta apenas pelo produto de funções que dependem apenas de cada uma das variáveis, ou seja,  $\phi(\rho, \theta, z) = R(\rho)\Theta(\theta)Z(z)$ , temos

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial [R(\rho)\Theta(\theta)Z(z)]}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{\partial^2 [R(\rho)\Theta(\theta)Z(z)]}{\partial \theta^2} \right) + \left( \frac{\partial^2 [R(\rho)\Theta(\theta)Z(z)]}{\partial z^2} \right) = 0. \quad (2.6)$$

Dividindo a equação (2.6) por  $R(\rho)\Theta(\theta)Z(z)$  e isolando o termo que contém  $Z(z)$ , obtemos

$$\frac{1}{R(\rho)\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d[R(\rho)]}{d\rho} \right) + \frac{1}{\Theta(\theta)\rho^2} \left( \frac{d^2[\Theta(\theta)]}{d\theta^2} \right) = -\frac{1}{Z(z)} \left( \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} \right). \quad (2.7)$$

Observe que, do lado esquerdo da equação (2.7), existe uma dependência em  $\theta$  e  $\rho$  enquanto que do outro lado há uma dependência em  $z$ . Como são variáveis independentes, para satisfazer esta condição, esta relação não pode depender das variáveis, ou seja, ela deverá ser uma constante, que chamaremos de  $-k^2$ . Assim, a relação define duas equações diferenciais para serem resolvidas.

$$\frac{1}{R(\rho)\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d[R(\rho)]}{d\rho} \right) + \frac{1}{\Theta(\theta)\rho^2} \left( \frac{d^2[\Theta(\theta)]}{d\theta^2} \right) = -k^2 \quad (2.8)$$

$$-\frac{1}{Z(z)} \left( \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} \right) = -k^2. \quad (2.9)$$

Ao considerarmos a coordenada  $z$  livre, por exemplo no caso do cilindro infinito, não podemos atribuir a ela nenhuma condição de contorno, assim a constante  $k$  pode assumir

apenas o valor nulo.

$$\frac{1}{R(\rho)\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d[R(\rho)]}{d\rho} \right) + \frac{1}{\Theta(\theta)\rho^2} \left( \frac{d^2[\Theta(\theta)]}{d\theta^2} \right) = 0, \quad (2.10)$$

$$- \frac{1}{Z(z)} \left( \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} \right) = 0, \quad (2.11)$$

Multiplicando os dois lados da equação (2.11) por  $-Z(z)$  teremos apenas uma integral de segunda ordem para resolver

$$\left( \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} \right) = 0$$

Integrando duas vezes esta equação, encontraremos a solução da parte em  $z$

$$Z(z) = A + Bz. \quad (2.12)$$

Para resolver a parte radial e angular, passaremos o termo em  $\theta$  da equação (2.10) para o outro lado dessa

$$\frac{1}{R(\rho)\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d[R(\rho)]}{d\rho} \right) = - \frac{1}{\Theta(\theta)\rho^2} \left( \frac{d^2[\Theta(\theta)]}{d\theta^2} \right). \quad (2.13)$$

Multiplicando ambos os lados por  $\rho^2$ , obtemos

$$\frac{\rho}{R(\rho)} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d[R(\rho)]}{d\rho} \right) = - \frac{1}{\Theta(\theta)} \left( \frac{d^2[\Theta(\theta)]}{d\theta^2} \right), \quad (2.14)$$

ou seja, o lado direito da equação acima contém apenas a variável  $\theta$ , bem como o lado esquerdo contém apenas a variável  $\rho$ . Novamente, a solução deve ser uma constante, que chamaremos  $\nu^2$ . Assim, teremos duas equações para serem resolvidas:

$$\frac{\rho}{R(\rho)} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{dR(\rho)}{d\rho} \right) = \nu^2 \text{ e}, \quad (2.15)$$

$$\frac{1}{\Theta(\theta)} \left( \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} \right) = -\nu^2. \quad (2.16)$$

A segunda equação pode ser escrita como

$$\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2} + \Theta(\theta)\nu^2 = 0. \quad (2.17)$$

Resolvendo a equação angular, notamos que ela possui coeficientes constantes. Então, sua equação característica é dada por

$$m^2 + \nu^2 = 0 \rightarrow m = \pm i\nu, \quad (2.18)$$

e as soluções que satisfazem essa condição são

$$m = i\nu \rightarrow \Theta(\theta) = A_\nu e^{i\nu\theta}, \quad (2.19)$$

$$m = -i\nu \rightarrow \Theta(\theta) = B_\nu e^{-i\nu\theta}. \quad (2.20)$$

Como a simetria do problema é cilíndrica, o intervalo de variação do ângulo  $\theta$  compreende-se entre 0 a  $2\pi$  e, nesses dois valores limites, o potencial elétrico é o mesmo, o que caracteriza uma condição de contorno periódica.

$$e^{\pm i\nu\theta} \Big|_{\theta=0} = e^{\pm i\nu\theta} \Big|_{\theta=2\pi} \rightarrow e^0 = e^{\pm i\nu 2\pi} \rightarrow 1 = \cos(2\pi\nu) \pm i \sin(2\pi\nu). \quad (2.21)$$

Os valores de  $\nu$ 's que satisfazem a equação acima devem ser inteiros. Portanto, a solução geral da parte angular é uma combinação linear das soluções encontradas

$$\Theta(\theta)_\nu = A_\nu e^{i\nu\theta} + B_\nu e^{-i\nu\theta} \quad (2.22)$$

Escrevendo as exponenciais em termos de cossenos e senos,

$$e^{\pm i\nu\theta} = \cos(\nu\theta) \pm i \sin(\nu\theta), \quad (2.23)$$

podemos reescrever a solução da parte angular, (2.22), como

$$\Theta_\nu(\theta) = A_\nu(\cos(\nu\theta) + i \sin(\nu\theta)) + B_\nu(\cos(\nu\theta) - i \sin(\nu\theta)). \quad (2.24)$$

Colocando em evidência os cossenos e senos

$$\Theta_\nu(\theta) = (A_\nu + B_\nu) \cos(\nu\theta) + (A_\nu - B_\nu)i \sin(\nu\theta) \quad (2.25)$$

e chamando  $A_\nu + B_\nu$  de uma nova constante  $C_\nu$  e  $i(A_\nu - B_\nu)$  de  $D_\nu$ , temos

$$\Theta_\nu(\theta) = C_\nu \cos(\nu\theta) + D_\nu \sin(\nu\theta), \text{ com } \nu \text{ inteiro,} \quad (2.26)$$

que é a solução da parte angular da equação de Laplace.

Se os valores da constante são nulos, isto é  $\nu = 0$ , a equação (2.17) torna-se uma equação diferencial de segunda ordem simples,

$$\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2} = 0,$$

cujos resultados podem ser obtidos integrando-a duas vezes, ou seja

$$\Theta(\theta) = C_0 + D_0\theta.$$

Resolvida a parte angular, partiremos para a solução da parte radial, ou seja, em termos de  $\rho$ , cuja equação diferencial está representada pela equação (2.15). Multiplicando ambos os lados por  $R(\rho)$ , expandindo as derivadas e colocando todos os termos do lado esquerdo da equação temos,

$$\rho^2 \frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \rho \frac{dR(\rho)}{d\rho} - \nu^2 R(\rho) = 0. \quad (2.27)$$

A equação acima é classificada como uma equação de Cauchy-Euler. A solução requer a substituição de  $\rho$  por  $e^t$  e efetuando a transformação das derivadas primeira e segunda,

encontramos

$$\frac{dR}{d\rho} = \frac{dt}{d\rho} \frac{dR}{dt} = \frac{1}{\rho} \frac{dR}{dt}, \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R}{d\rho^2} &= \frac{d}{d\rho} \left( \frac{dR}{d\rho} \right) = \frac{d}{d\rho} \left( \frac{1}{\rho} \frac{dR}{dt} \right) = \\ &= -\frac{1}{\rho^2} \frac{dR}{dt} + \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{dt} \right) \frac{dR}{d\rho} = \frac{1}{\rho^2} \left[ \frac{d^2 R}{dt^2} - \frac{dR}{dt} \right]. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Substituindo as derivadas acima na equação (2.27), obtemos a equação em termos da nova variável

$$\rho^2 \frac{1}{\rho^2} \left[ \frac{d^2 R}{dt^2} - \frac{dR}{dt} \right] + \rho \frac{1}{\rho} \frac{dR}{dt} - \nu^2 R = 0, \quad (2.30)$$

$$\frac{d^2 R}{dt^2} - \frac{dR}{dt} + \frac{dR}{dt} - \nu^2 R = 0 \quad (2.31)$$

$$\frac{d^2 R}{dt^2} - \nu^2 R = 0. \quad (2.32)$$

Do mesmo modo que a parte angular, sua equação característica será

$$m^2 + \nu^2 = 0 \rightarrow m = \pm i\nu$$

Assim, seguindo os mesmos passos efetuados anteriormente para a parte angular, obtemos a seguinte solução para a parte radial em termos da variável  $e^t$

$$R_\nu(t) = E_\nu e^{\nu t} + F_\nu e^{-\nu t}. \quad (2.33)$$

Voltando à variável  $\rho$ , ou seja,  $\rho = e^t$ , obtemos a solução da parte radial em termos de  $\rho$ ,

$$R_\nu(\rho) = E_\nu \rho^\nu + F_\nu \rho^{-\nu}. \quad (2.34)$$

Para  $\nu = 0$ , a equação (2.27) assume a forma

$$\rho^2 \frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \rho \frac{dR(\rho)}{d\rho} = 0,$$

contraindo esta equação na forma

$$\frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{dR}{d\rho} \right) = 0$$

podemos integrá-la

$$\int_{\rho_0}^{\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{dR}{d\rho} \right) = f_0$$

$$\left( \rho \frac{dR}{d\rho} \right)_{\rho_0}^{\rho} = f_0$$

$$\rho \frac{dR}{d\rho} - \rho_0 \frac{dR(\rho_0)}{d\rho} = f_0.$$

O termo negativo da equação acima é uma constante  $e_0$ , que somada com  $f_0$ , obtemos uma nova constante denominada  $F_0$

$$\rho \frac{dR}{d\rho} = f_0 + e_0 = F_0.$$

Integrando novamente, temos

$$\int_{\rho_0}^{\rho} \frac{dR}{d\rho} = \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{F_0}{\rho},$$

$$[R]_{\rho_0}^{\rho} = [F_0 \ln \rho]_{\rho_0}^{\rho},$$

$$R(\rho) - R(\rho_0) = F_0 \ln \rho - F_0 \ln \rho_0.$$

Usando a propriedade da diferença de logaritmos e sendo  $R(\rho_0)$  uma constante obtemos a solução da parte radial para  $\nu = 0$ :

$$R(\rho) = F_0 \ln \frac{\rho}{\rho_0} + E_0.$$

Neste desenvolvimento, temos uma solução para cada valor de  $\nu$  inteiro, incluindo para  $\nu = 0$ . A solução geral do potencial elétrico, em coordenadas cilíndricas, é uma

combinação de todas estas soluções e que pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \phi(\rho, \theta, z) = (C_0 + D_0\theta)(F_0 \ln \frac{\rho}{\rho_0} + E_0) + \sum_{\nu \neq 0} [E_\nu \rho^\nu + F_\nu \rho^{-\nu}] \times \\ [C_\nu \cos(\nu\theta) + D_\nu \sin(\nu\theta)](A + Bz), \end{aligned} \quad (2.35)$$

onde o Teorema da Unicidade garante que ela é geral. O próximo passo é aplicar as condições de contorno e calcular o potencial e o campo elétrico dentro do cilindro na presença de um campo externo perpendicular à direção longitudinal do cilindro.

### 2.1.2 Cálculo do campo elétrico para um campo incidente perpendicular ( $\mathbf{E}^{e\perp}$ ) ao cilindro

Para um cilindro infinito, a equação (2.35) deve ser invariante em relação à coordenada  $z$  e para isso assumimos o valor da constante  $B$  como nulo. Além disso, devido à condição periódica,  $\phi(\rho, \theta, z) = \phi(\rho, \theta + 2\pi, z)$ , vemos que o parâmetro  $\nu$  deve ser inteiro e a constante  $D_0$  também nula. Redefinindo as constantes e escrevendo as soluções para dentro e fora do cilindro, temos

$$\phi_1(\rho, \theta, z) = A_0 + B_0 \ln \left( \frac{\rho}{\rho_0} \right) + \sum_{\nu \neq 0} [A_\nu \rho^\nu + B_\nu \rho^{-\nu}] [C_\nu \cos(\nu\theta) + D_\nu \sin(\nu\theta)], \quad (2.36)$$

$$\phi_2(\rho, \theta, z) = F_0 + G_0 \ln \left( \frac{\rho}{\rho_0} \right) + \sum_{\nu \neq 0} [F_\nu \rho^\nu + G_\nu \rho^{-\nu}] [H_\nu \cos(\nu\theta) + I_\nu \sin(\nu\theta)], \quad (2.37)$$

no qual o índice 1 indica a solução para a parte interna e 2 para a externa. A primeira condição de contorno a ser aplicada seria quando  $\rho \rightarrow \infty$ . Para valores  $\rho$  muito grande, o campo elétrico externo homogêneo não é afetado pela presença do cilindro. Assim,

$$\mathbf{E}^{e\perp} = E^e \hat{i} \rightarrow \mathbf{E}^{e\perp} = -\nabla \phi_2 \rightarrow \phi_2 = -E^e x = -E^e \rho \cos(\theta). \quad (2.38)$$

Comparando o resultado da equação (2.38) com a solução proposta para o potencial elétrico fora do cilindro, e mostrado na equação (2.37), obtemos

$$F_0 = 0,$$



$$G_0 = 0,$$

$$F_1 = -E^e \text{ e}$$

$$F_\nu = 0 \text{ para } \nu \geq 2.$$

Com isso, o potencial elétrico fora do cilindro toma a forma

$$\phi_2(\rho, \theta, z) = -E^e \rho \cos(\theta) + \sum_{\nu \neq 0} G_\nu \rho^{-\nu} [H_\nu \cos(\nu\theta) + I_\nu \sin(\nu\theta)] \quad (2.39)$$

Quando  $\rho \rightarrow 0$ , devemos assegurar a convergência da série de  $\phi_1$  para um valor finito. Logo, as constantes  $B_\nu$  devem ser nulas e o potencial dentro do cilindro resulta

$$\phi_1(\rho, \theta, z) = A_0 + \sum_{\nu \neq 0} A_\nu \rho^\nu [C_\nu \cos(\nu\theta) + D_\nu \sin(\nu\theta)].$$

Por sua vez, devemos garantir a continuidade do potencial nas interfaces ( $\rho = a$ ) de maneira que  $\phi_1(\rho = a, \theta, z) = \phi_2(\rho = a, \theta, z)$ , ou seja,

$$\begin{aligned} A_0 + \sum_{\nu \neq 0} A_\nu a^\nu [C_\nu \cos(\nu\theta) + D_\nu \sin(\nu\theta)] &= -E^e a \cos(\theta) + \\ &\sum_{\nu \neq 0} G_\nu a^{-\nu} [H_\nu \cos(\nu\theta) + I_\nu \sin(\nu\theta)], \end{aligned} \quad (2.40)$$

o que implica:

$$A_0 = 0,$$

$$A_1 C_1 = -E^e + \frac{G_1 H_1}{a^2},$$

$$A_\nu C_\nu = \frac{G_\nu H_\nu}{a^{2\nu}} = 0, \quad \nu \geq 2 \text{ e}$$

$$A_\nu D_\nu = \frac{G_\nu I_\nu}{a^{2\nu}} = 0, \quad \nu \geq 1.$$

Nestas condições, podemos reescrever os potenciais como

$$\phi_1(\rho, \theta, z) = A_1 C_1 \rho \cos(\theta), \quad (2.41)$$

$$\phi_2(\rho, \theta, z) = -E^e \rho \cos(\theta) + G_1 H_1 \rho^{-1} \cos(\theta). \quad (2.42)$$

Definimos duas novas constantes,  $M_1 = A_1 C_1$  e  $N_1 = G_1 H_1$ . Por outro lado, sabendo que  $A_1 C_1 = -E^e + \frac{G_1 H_1}{a^2}$ , obtemos uma equação que relaciona essas duas novas constantes

$$M_1 = -E^e + \frac{N_1}{a^2}. \quad (2.43)$$

Assim, podemos reescrever os potenciais

$$\phi_1(\rho, \theta, z) = M_1 \rho \cos(\theta), \quad (2.44)$$

$$\phi_2(\rho, \theta, z) = -E^e \rho \cos(\theta) + N_1 \rho^{-1} \cos(\theta). \quad (2.45)$$

Além das condições de contorno utilizadas acima, temos as condições de continuidade na interface entre os meios 1 e 2. Nesse limite acontece uma mudança abrupta de permissividade. Logo, devemos analisar o comportamento do deslocamento elétrico e do campo elétrico nessa região.

Utilizando a Lei de Gauss, em termos do deslocamento elétrico ( $\mathbf{D}$ ) (equação (2.46)), em um pequeno cilindro de altura  $L$  e área  $dA$ , situado na interface entre os dois dielétricos (Fig. 2.4) temos

$$\oint_S \mathbf{D} \cdot \hat{n} dA = q \quad (2.46)$$

teremos para esse cilindro

$$\oint_S \mathbf{D} \cdot \hat{n} dA = \int_1 \mathbf{D}_1 \cdot \hat{n}_1 dA_1 + \int_2 \mathbf{D}_2 \cdot \hat{n}_2 dA_2 + \int_L \mathbf{D}_L \cdot \hat{n}_L dA_L$$

no qual  $A_1$  e  $A_2$  se referem às bases do cilindro enquanto  $A_L$  à área lateral;  $\hat{n}_1$  e  $\hat{n}_2$  são respectivamente as normais das bases 1 e 2. A integral em  $A_L$  não contribuirá ao tomarmos o limite  $L \rightarrow 0$ . A partir da Fig. 2.4 percebemos que  $\hat{n}_2 = -\hat{n}_1$ . Com essas definições podemos calcular as 2 integrais restantes

$$\oint_S \mathbf{D} \cdot \hat{n} dA = -\mathbf{D}_1 \cdot \hat{n}_2 A_1 + \mathbf{D}_2 \cdot \hat{n}_2 A_2. \quad (2.47)$$

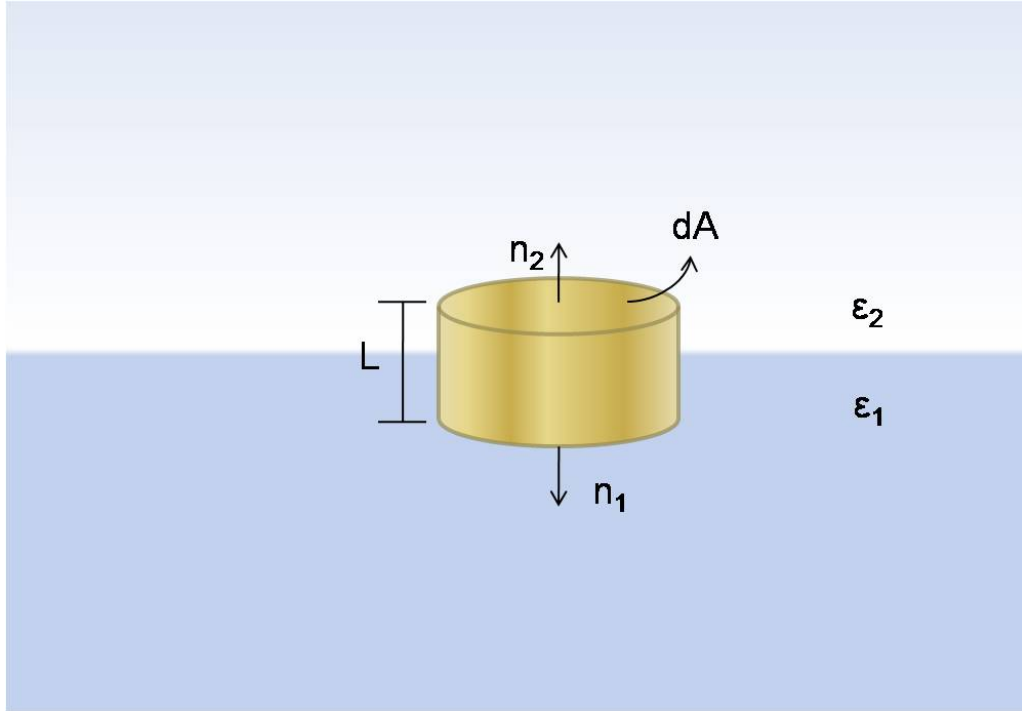


Fig. 2.4: Superfície Gaussiana cilíndrica entre 2 meios dielétricos

Claramente, a área  $A_1$  é igual a  $A_2$ , logo

$$\oint_S \mathbf{D} \cdot \hat{n} dA = (\mathbf{D}_2 \cdot \hat{n}_2 - \mathbf{D}_1 \cdot \hat{n}_1) A_2$$

De acordo com a Lei de Gauss mencionada, que relaciona a carga real dentro da superfície traçada do cilindro, podemos concluir que essa carga provém dessas superfícies da base, uma vez que  $L \rightarrow 0$ .

$$q = \sigma_{sup} dA_2,$$

no qual  $\sigma_{sup}$  é a densidade de carga superficial. Assim,

$$\oint_S \mathbf{D} \cdot \hat{n} dA = \sigma_{sup} dA_2.$$

Substituindo o resultado obtido na equação (2.47) temos

$$(\mathbf{D}_2 \cdot \hat{n}_2 - \mathbf{D}_1 \cdot \hat{n}_1) dA_2 = \sigma_{sup} dA_2$$

$$\mathbf{D}_2 \cdot \hat{n}_2 - \mathbf{D}_1 \cdot \hat{n}_1 = \sigma_{sup}.$$

Como o problema não apresenta cargas reais na interface entre os meios, ou seja,  $\sigma_{sup} = 0$ , obtemos

$$\mathbf{D}_{1\mathbf{n}} = \mathbf{D}_{2\mathbf{n}}, \quad (2.48)$$

que é a condição de continuidade da componente normal do deslocamento elétrico. Se o problema apresentasse cargas reais na superfície, não teríamos essa continuidade e sim uma descontinuidade que estaria relacionada com a densidade de carga  $\sigma$ .

A relação linear existente entre  $\mathbf{D}$  e  $\mathbf{E}$  é devida à condição do dielétrico ser isotrópico, resultando em uma relação bem simples de linearidade entre essas grandezas,

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}. \quad (2.49)$$

Sendo assim, podemos reescrever a condição de continuidade da componente normal do deslocamento elétrico em termos do campo elétrico,

$$\varepsilon_1 \mathbf{E}_{1\mathbf{n}} = \varepsilon_2 \mathbf{E}_{2\mathbf{n}} \quad (2.50)$$

Calculando os campos elétricos a partir dos potenciais obtidos nas equações (2.44) e (2.45) através de  $\mathbf{E}_{\mathbf{n}} = -\nabla_{\mathbf{n}}\phi$  obtemos

$$\mathbf{E}_{1\mathbf{n}} = -\frac{\partial\phi_1(\rho, \theta, z)}{\partial\rho} \Big|_{\rho=a} = -\frac{\partial[M_1\rho \cos(\theta)]}{\partial\rho} \Big|_{\rho=a} = -M_1 \cos(\theta)\hat{\rho} \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{2\mathbf{n}} = -\frac{\partial\phi_2(\rho, \theta, z)}{\partial\rho} \Big|_{\rho=a} = -\frac{\partial[-E^e\rho \cos(\theta) + N_1\rho^{-1} \cos(\theta)]}{\partial\rho} \Big|_{\rho=a} \\ [E^e \cos(\theta) + N_1a^{-2} \cos(\theta)]\hat{\rho}. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Aplicando a condição obtida na equação (2.50)

$$-\varepsilon_1 M_1 \cos(\theta)\hat{\rho} = \varepsilon_2 [E^e \cos(\theta) + N_1a^{-2} \cos(\theta)]\hat{\rho} \quad (2.53)$$

ou

$$M_1 = -\frac{\varepsilon_2 [E^e + N_1a^{-2}]}{\varepsilon_1}, \quad (2.54)$$

obtemos, novamente, uma equação com duas incógnitas. Juntamente com a equação (2.43) temos um sistema de duas equações e duas incógnitas. Substituindo  $M_1$  da equação (2.43) na equação (2.54)

$$-E^e + \frac{N_1}{a^2} = -\frac{\varepsilon_2[E^e + N_1 a^{-2}]}{\varepsilon_1}$$

logo,

$$N_1 = a^2 E^e \left[ \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right]$$

Substituindo  $N_1$  em qualquer uma das equações desse sistema, obtemos

$$M_1 = E^e \left[ \frac{-2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right]$$

Determinadas as constantes que aparecem explicitamente nos potenciais, vamos substituí-las em  $\phi_1$  e  $\phi_2$

$$\phi_1(\rho, \theta, x) = E^e \left[ \frac{-2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right] \rho \cos(\theta) \quad (2.55)$$

$$\phi_2(\rho, \theta, x) = -E^e \rho \cos(\theta) + \frac{a^2}{\rho} E^e \left[ \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right] \cos(\theta) \quad (2.56)$$

Com isso podemos calcular o campo elétrico interno e externo ao cilindro na presença de um campo perpendicular ao seu eixo. Através de  $-\nabla\phi_1$  calculamos o campo interno

$$\mathbf{E}_1 = - \left[ \hat{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \hat{\theta} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \phi_1, \quad (2.57)$$

$$\mathbf{E}_1 = - \left[ \hat{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \hat{\theta} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] E^e \left[ \frac{-2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right] \rho \cos(\theta),$$

$$\mathbf{E}_1 = E^e \left[ \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right] \left[ \hat{\rho} \cos(\theta) + \hat{\theta} \sin(\theta) \right]$$

$$\mathbf{E}_1 = \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} E^e \hat{i}. \quad (2.58)$$

Nesta abordagem, onde o fator de depolarização é definido como  $1 - \delta$ , onde

$$\delta = \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}. \quad (2.59)$$

Multiplicando a equação (2.58) por  $\varepsilon_1 + \varepsilon_2$  temos:

$$\varepsilon_1 \mathbf{E}_1 + \varepsilon_2 \mathbf{E}_1 = 2\varepsilon_2 E e^{\hat{i}}. \quad (2.60)$$

Se substituirmos  $\varepsilon_1 \mathbf{E}_1$  por  $\mathbf{D}_1$ , em (2.60), observamos que a permissividade do meio interno,  $\varepsilon_1$ , não aparece explicitamente. Isso torna essa expressão interessante, pois sua validade fica independente da relação entre os vetores  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{D}$ . Portanto ela é válida para qualquer que seja a forma dessa relação, incluindo corpos anisotrópicos. [12]

$$\frac{1}{2}(\mathbf{D}_1 + \varepsilon_2 \mathbf{E}_1) = \varepsilon_2 \mathbf{E}^{\perp} \quad (2.61)$$

Todo este procedimento desenvolvido nesta seção permite determinar as ordens de magnitude dos campos elétricos induzidos dentro do cilindro pela presença de um campo elétrico externo, aplicado tanto na direção perpendicular como na paralela ao eixo do cilindro. Na sequência, utilizando esses dados, analisaremos as intensidades da luz espalhada por um cilindro pequeno com três tipos diferentes de polarização no processo de excitação: paralela, perpendicular e depolarizada.

## 2.2 Espalhamento de luz por um cilindro pequeno

O espalhamento de ondas eletromagnéticas por sistemas cujas dimensões são pequenas, se comparadas com o comprimento de onda incidente, ( $\lambda$ ), se encaixa perfeitamente nas nossas condições. Nesse tipo de interação, a luz incidente induz multipolos elétrico e magnético que oscilam em concordância de fase com a onda incidente. Por sua vez a onda espalhada é irradiada em diferentes direções, como mostrado na (Fig. 2.5). [37]

Para o cálculo proposto devemos, primeiramente, obter o momento de dipolo elétrico ( $\mathbf{d}$ ) produzido no cilindro, considerando todas as condições de contorno existentes e ausên-

cia de cargas livres dentro do dielétrico, apenas cargas de polarização. Assim, qualquer que seja  $\mathbf{E}$  aplicado no cilindro resultará em uma carga total nula, ou seja,

$$\int \rho_{dv} dV = 0 = q \quad (2.62)$$

Essa integral pode ser interpretada da seguinte maneira: a densidade de carga média pode ser escrita como o divergente de um vetor polarização, que é usualmente denotado por  $-\mathbf{P}$ , dessa forma temos que:

$$\overline{\rho_{dv}} = -\nabla \cdot \mathbf{P}. \quad (2.63)$$

Para a interpretação do significado físico do vetor  $\mathbf{P}$  vamos considerar o momento de dipolo ( $\mathbf{d}$ ) de todas as cargas dentro do dielétrico. Por definição temos que  $\mathbf{d} = \int \mathbf{r} \overline{\rho_{dv}} dv$ . Logo,

$$\mathbf{d} = \int \mathbf{r} \overline{\rho_{dv}} dv = - \int \mathbf{r} \nabla \cdot \mathbf{P} dv. \quad (2.64)$$

Usando a identidade vetorial  $\nabla \cdot (\psi \mathbf{a}) = \mathbf{a} \cdot \nabla \psi + \psi \nabla \cdot \mathbf{a}$ , onde  $\mathbf{r} = \psi$  e  $\mathbf{P} = \mathbf{a}$ , temos:

$$- \mathbf{r} \nabla \cdot \mathbf{P} = (\mathbf{P} \cdot \nabla) \mathbf{r} - \nabla \cdot (\mathbf{r} \mathbf{P}), \quad (2.65)$$

que podemos integrar no volume

$$- \int \mathbf{r} \nabla \cdot \mathbf{P} dv = \int (\mathbf{P} \cdot \nabla) \mathbf{r} dv - \int \nabla \cdot (\mathbf{r} \mathbf{P}) dv, \quad (2.66)$$

e aplicando o teorema da divergência no segundo termo do lado direito da equação (2.66), encontramos

$$- \int \mathbf{r} \nabla \cdot \mathbf{P} dv = \int (\mathbf{P} \cdot \nabla) \mathbf{r} dv - \oint \mathbf{r} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{n}) ds. \quad (2.67)$$

Como estamos tratando um sistema dielétrico com simetria cilíndrica, ou seja, é um corpo regular, as cargas de polarização superficial são formadas nas superfícies opostas. Como o vetor unitário é sempre orientado para fora do volume, a integral na superfície fechada resultará nula já que supomos que nenhuma carga livre foi introduzida. Quanto

ao segundo termo, temos que  $\nabla \mathbf{r} = 1$ , logo:

$$\int \mathbf{r} \bar{\rho}_{dv} dv = \int \mathbf{P} dv \quad (2.68)$$

Assim, interpretamos o vetor de polarização ( $\mathbf{P}$ ) como sendo o momento de dipolo por unidade de volume do dielétrico, ou seja,  $\mathbf{d} = V\mathbf{P}$ , sendo  $\nabla \cdot \mathbf{P}$  igual à densidade de carga de polarização *volumétrica* e  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{n}$  a densidade de carga *superficial* induzida no sistema.

Ao aplicarmos um campo externo ( $\mathbf{E}^e$ ) no dielétrico em questão, que não apresenta momentos de dipolo intrínsecos, seus constituintes apolares (átomos), que são formados por cargas positivas e negativas, sofrem a ação desse campo. As forças opostas às cargas positivas e negativas, produzem uma separação por uma certa distância, e, assim, resultando na formação de momentos de dipolo induzidos (grandezas microscópicas ou atômicas) na mesma direção e sentido de ( $\mathbf{E}^e$ ).

A relação entre a polarização e o campo elétrico necessita de um modelo microscópico da estrutura do dielétrico. Entretanto, notamos que a perturbação gerada pelo campo externo aplicado é muito pequena em comparação com os campos intra-atômicos. Essa consideração nos fornece o resultado de que a polarização (grandeza macroscópica), na presença de um campo externo  $\mathbf{E}^e$ , é proporcional ao campo resultante interno no cilindro ( $\mathbf{E}_1$ ), ou seja,

$$\mathbf{d} = V\mathbf{P} = V\chi\mathbf{E}_1,$$

no qual  $\chi$  é a susceptibilidade elétrica. Em uma dedução simples podemos interpretar o significado físico dessa constante. O deslocamento elétrico provém da resultante do campo elétrico aplicado e da polarização do material. Considerando o material isotrópico, ou seja, que obedece a relação (2.49) e relacionando o fato da proporcionalidade entre  $\mathbf{E} + \mathbf{P}$  temos,

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \varepsilon_2 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \\ \varepsilon_1 \mathbf{E} &= \varepsilon_2 \mathbf{E} + \chi \mathbf{E}, \\ \varepsilon_1 \mathbf{E} &= (\varepsilon_2 + \chi) \mathbf{E}, \\ \varepsilon_1 &= \varepsilon_2 + \chi, \end{aligned}$$



$$\chi = \varepsilon_1 - \varepsilon_2,$$

ou seja,  $\chi$  corresponde à diferença entre as constantes dielétricas interna e externa do sistema.

Podemos então obter  $\mathbf{d}$  somente em termos dos  $\varepsilon$ ,

$$\mathbf{d} = V(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\mathbf{E}_1. \quad (2.69)$$

Na seção anterior calculamos o campo elétrico no interior do material para duas configurações: quando o  $\mathbf{E}^e$  incide paralelamente à direção longitudinal do cilindro, que resulta em uma polarização ( $\mathbf{P}(\parallel)$ ) paralela ao eixo do cilindro. Já quando o campo incide direcionado perpendicular ao eixo do fio, resultará em uma polarização ( $\mathbf{P}(\perp)$ ) perpendicular ao eixo do fio.

Assim, obtemos duas configurações para o momento de dipolo induzido: quando a incidência é paralela ( $\mathbf{d}(\parallel)$ ), fazemos a substituição da equação (2.1) na equação acima, quando é perpendicular ( $\mathbf{d}(\perp)$ ), substituímos na equação (2.58). Assim,

$$\mathbf{d}(\parallel) = V(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\mathbf{E}^{e\parallel}, \quad (2.70)$$

$$\mathbf{d}(\perp) = V(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\frac{2\varepsilon_2\mathbf{E}^{e\perp}}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}. \quad (2.71)$$

Considerando a luz incidente como uma onda plana monocromática na direção  $\mathbf{n}_0$  com o vetor de polarização na direção  $\mathbf{j}_0$  (Fig. 2.5). O campo incidente  $\mathbf{E}_i$  será

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{j}_0 E^e e^{\frac{i\omega\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{x}}{c}}, \quad (2.72)$$

onde omitimos a dependência temporal, para simplicidade. Longe do objeto o campo

espalhado  $\mathbf{E}_s$  é dado por

$$\mathbf{E}_s = \frac{\omega^2 e^{\frac{ir\omega}{c}}}{rc^2} [(\mathbf{n} \times \mathbf{d}) \times \mathbf{n} - \mathbf{n} \times \frac{\mathbf{m}}{c}], \quad (2.73)$$

no qual  $\mathbf{n}$  é o vetor unitário na direção de observação,  $r$  é a distância do objeto e  $\mathbf{m}$  é o momento de dipolo magnético induzido.

Podemos omitir o termo do dipolo magnético da equação acima, pois, como normalmente ocorre, a permissividade magnética da grande maioria dos meios dielétricos é próxima de 1. [12]

$$\mathbf{E}_s = \frac{\omega^2 e^{\frac{ir\omega}{c}}}{rc^2} [(\mathbf{n} \times \mathbf{d}) \times \mathbf{n}]. \quad (2.74)$$

Assim, definido  $\mathbf{E}_s$  podemos calcular o vetor magnético  $\mathbf{H}$

$$\mathbf{H} = \mathbf{n} \times \mathbf{E} = \frac{\omega^2 e^{\frac{ir\omega}{c}}}{rc^2} \{ \mathbf{n} \times [(\mathbf{n} \times \mathbf{d}) \times \mathbf{n}] \} = \frac{\omega^2 e^{\frac{ir\omega}{c}}}{rc^2} \mathbf{n} \times \mathbf{d}.$$

Através do vetor de Poynting ( $\mathbf{S}$ ), cujo significado físico representa a taxa de energia transportada por unidade de área e por unidade de tempo, podemos calcular a intensidade ( $I$ ) de luz espalhada definida a partir do seu valor médio.

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$$

$$dA = |\bar{\mathbf{S}}| r^2 d\Omega = |\bar{\mathbf{H}}|^2 r^2 d\Omega = \frac{1}{2} |\mathbf{H}|^2 r^2 d\Omega$$

$$dA = \frac{1}{2} \frac{\omega^4}{c^4 r^2} |\mathbf{n} \times \mathbf{d}|^2 r^2 d\Omega$$

onde  $r^2 d\Omega = r^2 \sin(\theta) d\theta d\phi$  é o elemento de volume.

Podemos assim calcular a intensidade da luz espalhada para cada direção de polarização:  $I^{\parallel}(\alpha)$  para a polarização paralela, e  $I^{\perp}(\alpha)$  para polarização perpendicular ao plano formado por  $\mathbf{n}$  e o fio. Nesta definição,  $\alpha$  representa a condição de polarização para a excitação. Assim definimos a intensidade em função das polarizações incidentes,

de excitação, e emitidas como

$$\frac{dA}{r^2 d\Omega} = I^\beta(\alpha) = \frac{1}{2} \frac{\omega^4}{c^4 r^2} |\mathbf{n} \times \mathbf{d}^\beta(\alpha)|^2,$$

ou seja,

$$I^\perp(\alpha) = \frac{1}{2} \frac{\omega^4}{c^4 r^2} |\mathbf{d}^\perp(\alpha)|^2,$$

$$I^\parallel(\alpha) = \frac{1}{2} \frac{\omega^4}{c^4 r^2} |\mathbf{d}^\parallel(\alpha)|^2 \text{sen}^2(\gamma).$$

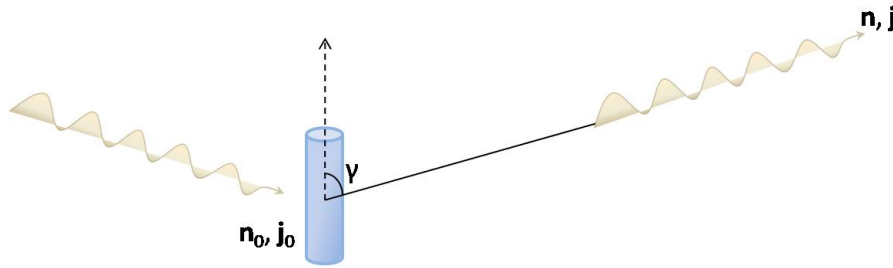


Fig. 2.5: Esquema mostrando o ângulo de detecção ( $\gamma$ ) para o espalhamento de uma onda eletromagnética monocromática incidente sobre um cilindro dielétrico pequeno.

A intensidade do vetor resultante dessa polarização linear pode ser expressa em função do ângulo  $\phi$ , ângulo situado no mesmo plano formado pelos momentos de dipolo elétricos (Fig. 2.6), ou seja,

$$I_\phi = \frac{\omega^4}{2c^4 r^2} [ |d_\parallel(\alpha) \text{sen}(\gamma) \cos(\phi)|^2 + |d_\perp(\alpha) \text{sen}(\phi)|^2 ].$$

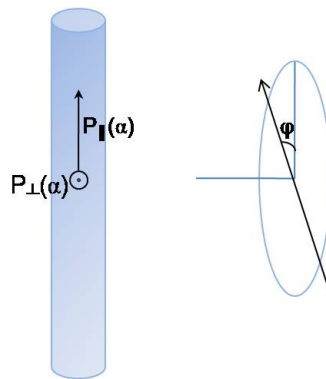


Fig. 2.6: Representação do ângulo  $\phi$  no mesmo plano das polarizações paralela e perpendicular.

Esta expressão resulta interessante, pois podemos discutir os aspectos de uma emissão

relacionados com as diferentes polarizações de excitação e detecção. Levando em consideração a condição de polarização fixa na excitação temos duas configurações possíveis: uma com a polarização incidente paralela e outra perpendicular ao eixo do fio. Para uma excitação com polarização paralela ocorre a indução de dipolos elétricos apenas na direção ao longo do fio, em outras palavras, não há carga de polarização na superfície lateral do cilindro, resultando nulo o momento de dipolo  $\mathbf{d}_{\perp}(\parallel)$ . Logo a intensidade adquire a forma

$$I_{\phi} = \frac{\omega^4 E e^2}{2c^4 r^2} (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 [\text{sen}(\gamma) \cos(\phi)]^2.$$

Usando os valores  $\kappa = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} = 12.4$  para o *InP*, podemos substituir na equação acima,

$$I_{\phi} = \frac{\omega^4 E e^2}{2c^4 r^2} \varepsilon_2 (11.4)^2 [\text{sen}(\gamma) \cos(\phi)]^2. \quad (2.75)$$

Graficando  $I_{\phi}$  (Fig. 2.7) observamos que a máxima intensidade ocorre sempre para um ângulo de detecção  $\gamma = \pi/2$  e resulta periódica em relação ao ângulo  $\phi$ .

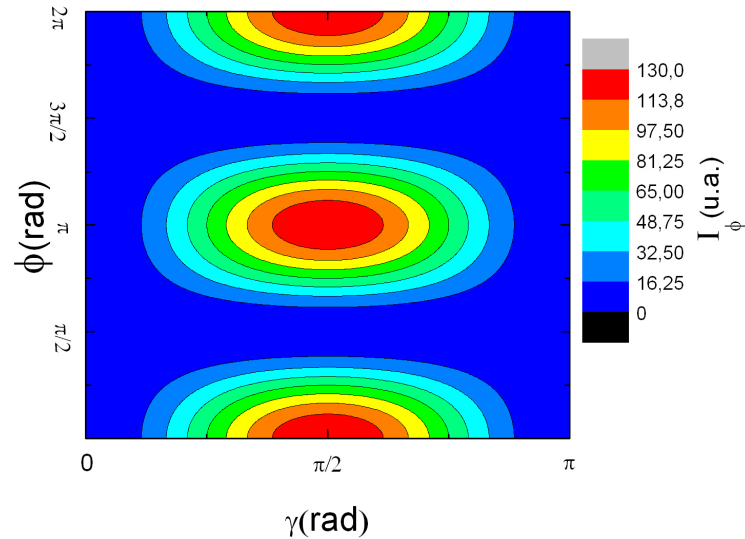


Fig. 2.7: Intensidade versus o ângulo de detecção ( $\gamma$ ) e o ângulo de polarização ( $\phi$ ) para uma mesma condição de excitação óptica polarizada na direção paralela ao eixo do fio.

Para a outra condição de excitação, com a luz incidente polarizada perpendicularmente ao fio, temos o caso inverso do anterior, ou seja, só há indução de carga de polarização (dipolo induzido) na superfície lateral do fio resultando nulo o momento de dipolo  $\mathbf{d}_{\parallel}(\perp)$ .

Assim, a intensidade assume a forma

$$I_\phi = \frac{\omega^4 E e^2}{2c^4 r^2} (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 \left[ \frac{2\varepsilon_2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} \text{sen}(\phi) \right]^2.$$

Fazendo a mesma substituição dos parâmetros de material, obtemos

$$I_\phi = \frac{\omega^4 E e^2}{2c^4 r^2} \varepsilon_2 (11.4)^2 \left[ \frac{2}{13.4} \text{sen}(\phi) \right]^2. \quad (2.76)$$

Podemos notar uma independência da intensidade com o ângulo de detecção  $\gamma$ , como mostrado na (Fig. 2.5). Esse resultado ocorre devido ao fato do plano de polarização  $\mathbf{d}_\beta(\perp)$  ser perpendicular ao plano de detecção. A intensidade da luz polarizada paralela

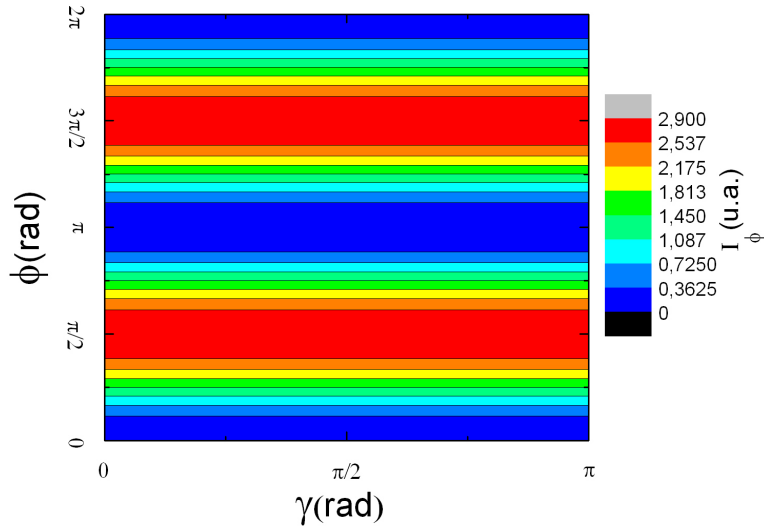


Fig. 2.8: Intensidade versus o ângulo de detecção ( $\gamma$ ) e o ângulo de polarização ( $\phi$ ) para uma condição de excitação polarizada fixa na direção perpendicular ao fio.

ao fio está representada na Fig. 2.8, onde observamos claramente a independência com o ângulo  $\gamma$  de detecção.

Quando consideramos uma excitação ótica depolarizada, onde há criação de cargas de polarização (dipolo induzido) tanto na direção paralela quanto na perpendicular, obtemos o seguinte resultado para a intensidade

$$I_\phi = \frac{\omega^4}{2c^4 r^2} [ |d_{\parallel}(\parallel) \text{sen}(\gamma) \cos(\phi)|^2 + |d_{\perp}(\perp) \text{sen}(\phi)|^2 ],$$

que nada mais é a soma das intensidades com excitação em uma direção definida. Substituindo os resultados descritos nas equações (2.75 e 2.76), temos

$$I_\phi = \frac{\omega^4 E^2}{2c^4 r^2} \varepsilon_2 (11.4)^2 \left[ [\text{sen}(\gamma) \cos(\phi)]^2 + \left[ \frac{2}{13.4} \text{sen}(\phi) \right]^2 \right].$$

Observando os máximos de intensidade das Figs. 2.7 e 2.8, e sabendo que para o caso de uma excitação depolarizada há uma soma dessas, podemos supor que a contribuição da excitação paralela é dominante, fazendo com que a outra seja praticamente imperceptível. A Fig. 2.9, que demonstra o gráfico de  $I_\phi$  em relação aos ângulos  $\gamma$  e  $\phi$  para uma excitação depolarizada, comprova essa observação.

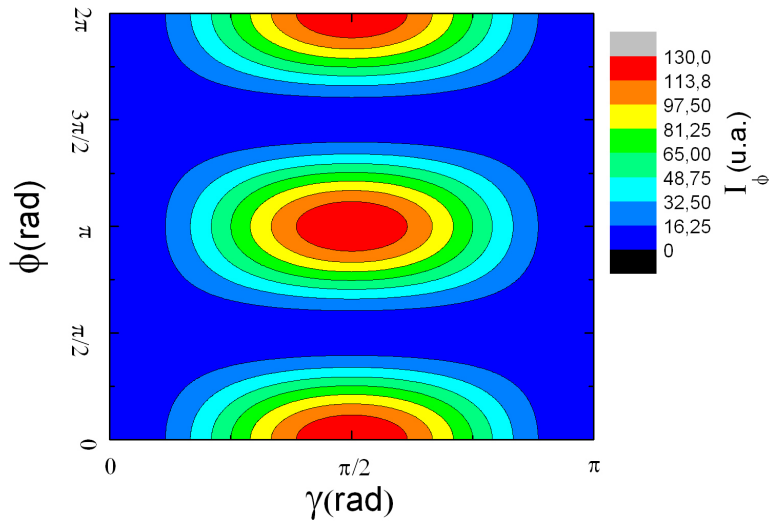


Fig. 2.9: Intensidade versus o ângulo de detecção ( $\gamma$ ) e o ângulo de polarização ( $\phi$ ) para uma condição de excitação depolarizada.

O fator de depolarização ( $\sigma_{dpol}$ ), tratado aqui classicamente, só tem sentido para uma condição de excitação depolarizada e é caracterizado pela relação entre as intensidades  $I^{\parallel}(\parallel)$  e  $I^{\perp}(\perp)$  na forma,

$$\sigma_{dpol} = \frac{I^{\parallel}(\parallel)}{I^{\perp}(\perp)} = \frac{|d_{\parallel}(\parallel)|^2}{|d_{\perp}(\perp)|^2} \text{sen}^2(\gamma) = \frac{|1|^2}{\left|\frac{2}{13.4}\right|^2} \text{sen}^2(\gamma) = 44.89 \text{sen}^2(\gamma).$$

A Fig. 2.10 mostra a relação desse fator de depolarização com o ângulo  $\gamma$ , onde percebemos que ele é máximo para a excitação incidente na direção normal ao eixo do fio.

Considerando a aproximação de dipolo desenvolvida até aqui, na qual a intensidade

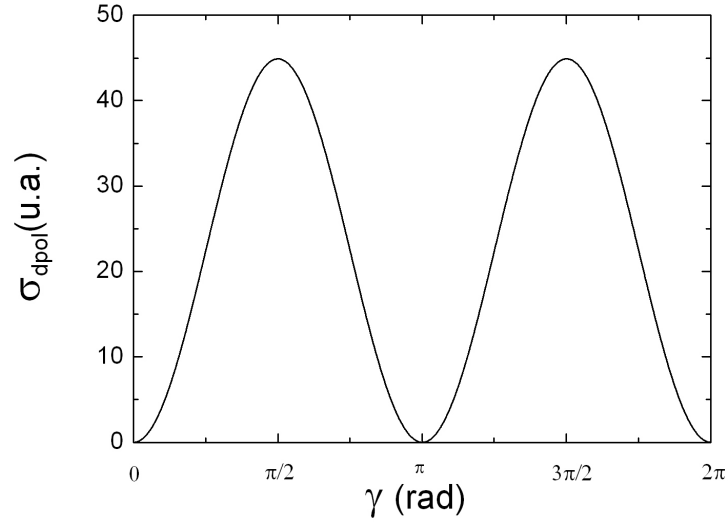


Fig. 2.10: Fator de depolarização ( $\sigma_{dpol}$ ) versus o ângulo de detecção  $\gamma$  para uma excitação depolarizada.

da luz espalhada é proporcional a  $|\mathbf{d}|^2 \propto |\mathbf{E}_1|^2$ , considerando o ângulo de detecção da luz espalhada normal à direção longitudinal do fio, ou seja,  $\gamma = \frac{\pi}{2}$ , que representa a máxima detecção, e considerando o espalhamento sendo elástico, temos que o grau de polarização ( $\sigma$ ) é dado por

$$\sigma = \frac{I^{\parallel}(\parallel) - I^{\perp}(\perp)}{I^{\parallel}(\parallel) + I^{\perp}(\perp)} = \frac{\sigma_{dpol} - 1}{\sigma_{dpol} + 1} = \frac{1 - \delta^2}{1 + \delta^2},$$

onde  $\delta$  está expresso na equação (2.59). Se usarmos o valor da constante dielétrica do “bulk” de *InP*,  $\kappa = 12.4$ , obtemos, para o grau de polarização o valor  $\sigma = 0.96$ , que está em acordo com os resultados experimentais apresentados no “inset” da Fig. 2.2 [1]. A Fig. 2.11 apresenta o grau de polarização  $\sigma$  versus o ângulo de detecção  $\gamma$ , onde notamos claramente que o valor máximo se obtém para o ângulo normal à direção longitudinal do fio.

Ao considerarmos uma abordagem clássica vemos, na Fig. 2.2(A), uma aparente reprodução satisfatória dos resultados experimentais, ou seja, para uma condição de excitação depolarizada, ocorre a detecção de emissões tanto na direção perpendicular quanto paralela ao eixo do fio com  $\sigma = 0.96$ . Este tipo de análise pode ser encontrado em diferentes trabalhos [1, 11, 7] onde discute-se a emissão de PL de nano-fios, porém a nossa dedução detalhada permite esclarecer sob quais condições tais valores são obtidos. O formalismo,

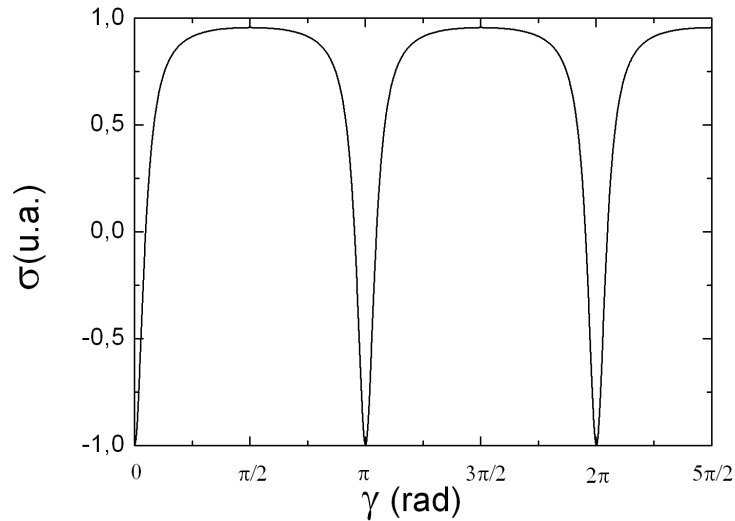


Fig. 2.11: Grau de polarização ( $\sigma$ ) versus o ângulo de detecção  $\gamma$  para uma excitação depolarizada como detalhado aqui aplica-se à condição de espalhamento elástico. A PL dista de ser um fenômeno elástico sendo diferentes as frequências da luz incidente e espalhada.

Também, de acordo com a abordagem clássica exposta, quando a excitação acontece com luz polarizada paralelamente ao fio o resultado esperado é uma detecção somente nessa mesma direção, o que mostra a Fig. 2.7. Porém o resultado apresentado na Fig. 2.2(B) [1], com essa mesma condição de excitação, apresenta uma curva referente a detecção de uma polarização perpendicular além da paralela, o que torna esta abordagem clássica imprópria para analisar este experimento.

Podemos concluir, então, que a abordagem clássica permite descrever a anisotropia do espalhamento de luz em nanofios dielétricos. Porém, em toda esta descrição foi considerada uma premissa fundamental: a frequência da luz incidente é igual à frequência de luz emitida (espalhamento elástico). Notamos que vários trabalhos publicados [1, 11, 7] utilizam esta hipótese mesmo quando a frequência incidente é maior do que a emitida, como observado na maioria dos casos dos experimentos de PL. Efeitos de quantização devido ao confinamento podem ser relevantes, assim como os complexos efeitos de relaxação de portadores entre os estados excitados e os estados fundamentais das bandas de condução e de valência que participam da recombinação óptica final. Estes estados, por sua vez, possuem propriedades de simetria que determinam regras de seleção para transições



ópticas que não são levadas em conta numa abordagem clássica. O próximo capítulo será dedicado ao estudo de alguns desses efeitos no mesmo sistema de nanofios semicondutores, afim de elucidarmos os resultados onde a eletrodinâmica clássica falha.

### 3. ESTRUTURA ELETRÔNICA DE NANOFIOS: EFEITOS DE QUANTIZAÇÃO

Como destacado na introdução, o estudo da estrutura eletrônica de nanofios permite correlacionar a resposta ótica destes sistemas com suas propriedades estruturais: geometria, composição, além de permitir a elucidação dos efeitos de campos eletromagnéticos externos e tensões. As peculiaridades quânticas do confinamento quase-uni-dimensional aparecem claramente neste tipo de análise.

Um exemplo onde a abordagem clássica não seria adequada para a descrição do espalhamento da luz por nanofios, está ilustrado na Fig. 3.1. Aqui, mostram-se os espectros de emissão em nanofios de *InP* crescidos na direção [001] de um substrato do mesmo material. Uma imagem de microscopia destes nanofios é mostrada na Fig. 3.2. O pico A corresponde às emissões provenientes do substrato, enquanto os dois picos indicados como B e C correspondem às emissões para transições entre estados do fio. A existência de bandas de emissão bem definidas, independentemente da frequência da radiação incidente (ao contrario do efeito clássico detalhado anteriormente), é um indício de efeitos de quantização.

Estes resultados experimentais foram fornecidos por colaboradores da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG) que nos propuseram a tarefa de identificar a natureza das emissões B e C e elucidar as razões para a dependência anômala de suas intensidades com as polarizações da excitação e das emissões. Como mostra a Fig. 3.1, temos 4 tipos diferentes de combinações de polarizações entre a excitação e a emissão. A linha verde pontilhada é o resultado de fótons incidentes com polarização linear perpendicular ao eixo do nanofio e emitidos com polarização paralela a ele. A linha preta contínua refere-se a fótons incidentes e emitidos com polarização paralela ao fio. A linha contínua azul

resulta de fótons incidentes polarizados perpendicularmente ao eixo do fio e emitidos nessa mesma configuração. Finalmente para a linha pontilhada vermelha temos fótons incidentes com polarização paralela e emitidos polarizados perpendicularmente. Em todas as configurações foi detectada a emissão em retrocesso (“*back scattering*”)

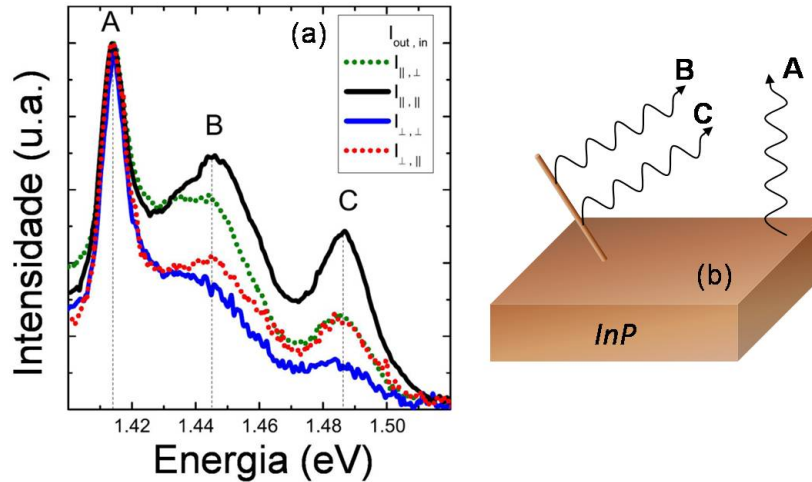


Fig. 3.1: (a) Espectro de emissão de PL, a 77 K, para quatro configurações de fótons incidentes e emitidos [35] com polarizações lineares. (b) Figura esquemática mostra a origem dos picos de emissão.

Para a descrição da estrutura eletrônica destes nanofios foi importante o conhecimento dos detalhes sobre sua morfologia. As estruturas foram crescidas pelo método de crescimento vapor-líquido-sólido numa câmara de reação CBE (“*Chemical Beam Epitaxy*”) [40]. A Fig. 3.2A apresenta a morfologia e a estrutura cristalina da amostra sintetizada, usando microscopia eletrônica de varredura (MEV) enquanto a Fig. 3.2B mostra fotos de microscopia eletrônica de transmissão (MET). Estes resultados comprovam a direção de crescimento do nanofio de *InP* como sendo [001]. Através da análise da transformada de Fourier das imagens de alta resolução da MET (Fig. 3.2C), juntamente com os padrões de uma área selecionada por difração de elétrons (Fig. 3.2D), foi possível verificar que os nanofios estavam tensionados [40]. Os valores das deformações extraídos destas análises, foram  $\epsilon_{\parallel} = -0.9\%$ , para a tensão biaxial e  $\epsilon_{zz} = 1.00\%$  ao longo do eixo do fio.

Conhecidos estes dados sobre as tensões, demos início à montagem de um modelo de cálculo de estrutura eletrônica que levasse em conta os efeitos do confinamento assim como dos campos de tensões detectados. Para isso, abordaremos alguns fundamentos da teoria quântica de sólidos que serão apresentados nas próximas seções.

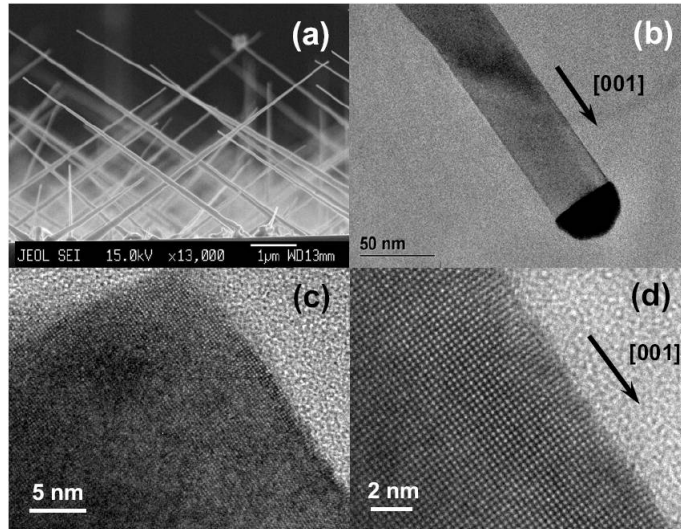


Fig. 3.2: (a) Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) de nanofios de InP na direção de crescimento [001]. (b) Imagem de Microscopia Eletrônica de Transmissão (MET) do nanofio de InP. (c) Imagem de alta resolução da MET do canto da base do nanofio. (d) Imagem de alta resolução da MET da parte lateral do nanofio [35].

### 3.1 Fundamentos do modelo $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ : Modelo de Luttinger.

A simulação teórica das propriedades eletrônicas e óticas de materiais semicondutores está sempre sujeita a aproximações, dada a dificuldade inevitável de tratar sistemas de muitas partículas. O cálculo da estrutura de bandas de sistemas semicondutores segue este padrão. O formalismo escolhido para tal, neste trabalho, está fundamentado na idéia de que a influência de um potencial periódico sobre um elétron em uma rede cristalina pode ser levada em conta através do conceito de massa efetiva [42]. Devido à presença do potencial cristalino periódico pode-se fazer uso do teorema de Bloch, o que permite (em primeira aproximação) descrever o estado eletrônico do elétron como um portador de carga com uma massa efetiva  $m^*$  diferente do elétron livre. Esta abordagem está fundamentada num modelo de Hamiltoniano chamado de método  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ .

De acordo com os tipos de estados eletrônicos a serem caracterizados e os materiais semicondutores, diferentes aproximações podem ser agregadas a este formalismo. Neste trabalho usaremos dois modelos: a aproximação parabólica para a banda de condução e o chamado modelo de Luttinger para a banda de valência.

O método  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  permite o cálculo da estrutura de banda nas regiões próximas a um ponto de simetria. Para semicondutores com simetria cristalina do tipo blenda de zinco,

o ponto de simetria está localizado em  $\mathbf{k} = 0$  (ponto- $\Gamma$ ) que é o centro da rede recíproca onde se localizam os estados que participam das recombinações óticas.

Basicamente, seguiram-se 3 passos para o cálculo efetivo da estrutura de bandas para os sistemas de interesse: (i) transformamos o Hamiltoniano do cristal para a representação  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ ; (ii) reduzimos o problema para o cálculo dos autovalores do Hamiltoniano; e (iii) introduzimos aproximações.

Partimos da equação de Schrödinger, para executar o primeiro passo

$$\mathbf{H}_0\Psi(\mathbf{r}) = \mathcal{E}\Psi(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

no qual o Hamiltoniano que determina a energia total dos portadores de carga é composto pelo termo de energia cinética e pelo termo de energia potencial,  $U(\mathbf{r})$ , que possui a periodicidade da rede cristalina, na forma

$$\mathbf{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + U(\hat{\mathbf{r}}). \quad (3.2)$$

Aqui,  $\hat{p} = -i\hbar\nabla$  é o operador momento linear e  $m_0$  é a massa livre de um elétron.

Devido à periodicidade de  $U(\mathbf{r})$ , usamos o teorema de Bloch [43], que permite restringir o espectro dos autovalores de  $\hat{p}$  que caracterizam o movimento do portador de carga à primeira zona de Brillouin do espaço recíproco. Sendo  $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$  a energia total da partícula para um certo vetor de onda  $\mathbf{k}$ , onde  $n$  enumera as possíveis bandas de energia para este mesmo vetor, podemos escrever as funções de onda da equação (3.1) como

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.3)$$

onde  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  são funções que possuem a mesma periodicidade do potencial  $U(\mathbf{r})$ . Devido à simetria translacional, podemos realizar uma transformação canônica sobre o operador  $\mathbf{H}_0$  usando as ondas planas e os vetores de onda  $\mathbf{k}$ , na forma

$$H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{H}_0e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (3.4)$$

Este Hamiltoniano modificado pode ser expresso através da expansão em série de Taylor das exponenciais. Colecionando os termos temos

$$H(\mathbf{k}) = \mathbf{H}_0 - i\mathbf{k} \cdot [\hat{\mathbf{r}}, \mathbf{H}_0] - \frac{1}{2} \sum_{ij} k_i k_j [r_i, [r_j, \mathbf{H}_0]] + \dots \quad (3.5)$$

Usando relações de comutação para os operadores posição e momento linear,  $[\mathbf{r}, \mathbf{H}_0] = i\hbar\mathbf{p}/m_0$  e  $[\mathbf{r}, [\mathbf{r}, \mathbf{H}_0]] = -i\hbar^2\delta_{ij}/m_0$ , podemos escrever a forma geral do Hamiltoniano modificado como

$$H(\mathbf{k}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \quad (3.6)$$

que é o operador que determina as autofunções e autovalores para a parte periódica,  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , da função de Bloch. Assim, a equação (3.1) transforma-se em

$$\left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right] u_{n\mathbf{k}} = \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}. \quad (3.7)$$

No ponto de alta simetria  $\mathbf{k} = 0$ , os termos dependentes de  $\mathbf{k}$  na equação (3.7) se anulam. Assim, descrevemos a solução para um valor de  $\mathbf{k}$  da equação (3.7) próximo o ponto- $\Gamma$ ,

$$u_{n\mathbf{k}} = \sum_m C_m(\mathbf{k}) u_{m0}. \quad (3.8)$$

Inserindo a solução (3.8) na equação (3.7), multiplicando pelo complexo conjugado,  $u_{m0}^*$ , e integrando sobre todo o volume da célula unitária, obtemos

$$\sum_m \left[ \left( \mathcal{E}_{n0} - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \delta_{nm} \right) + \frac{\hbar \mathbf{k}}{2m_0} \cdot \langle n0 | \hat{\mathbf{p}} | m0 \rangle \right] C_m(\mathbf{k}) = 0. \quad (3.9)$$

A diagonalização da equação acima resulta na relação de dispersão  $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$  e nos coeficientes de expansão  $C_m(\mathbf{k})$  para todos os valores de  $\mathbf{k}$  e todas as bandas  $n$ .

Supondo que a  $n$ -ésima banda com energia  $\mathcal{E}_{n0}$  não é degenerada e tomando valores pequenos de  $\mathbf{k}$ , podemos utilizar a teoria de perturbação e obter

$$C_n \sim 1; \quad C_m = \frac{\hbar \mathbf{k}}{2m_0} \cdot \frac{\hat{\mathbf{p}}_{nm}}{\mathcal{E}_{n0} - \mathcal{E}_{m0}}, \quad (3.10)$$

que, quando substituídos na equação (3.9), fornecem a correção de segunda ordem na energia  $\mathcal{E}_{n0}$

$$\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} = \mathcal{E}_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{|\hat{\mathbf{p}}_{nm} \cdot \mathbf{k}|^2}{\mathcal{E}_{n0} - \mathcal{E}_{m0}}. \quad (3.11)$$

Quando  $\mathbf{k}$  é muito pequeno, a relação de dispersão das bandas não degeneradas é parabólica e, nas proximidades do ponto- $\Gamma$

$$\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} = \mathcal{E}_{n0} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j} k_i \frac{1}{m_n^{ij}} k_j, \quad (3.12)$$

no qual os índices  $i, j$  referem-se as coordenadas cartesianas  $x, y, z$  e  $m_n^{ij}$  é o chamado “tensor de massa efetiva” que, usando a equação (3.11), fica definido como [43]

$$\frac{1}{m_n^{ij}} = \frac{1}{m_0} \delta_{ij} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{n \neq m} \frac{p^i p^j}{\mathcal{E}_{n0} - \mathcal{E}_{m0}} \quad (3.13)$$

Este resultado obtido para o tensor de massa efetiva, leva em consideração apenas os termos cinético e o potencial periódico da rede cristalina de um portador de carga. Porém, como será discutido, outros cálculos podem introduzir a correção relativística de spin-órbita ao Hamiltoniano do sistema e este novo termo faz com que alteremos apenas o operador  $\hat{\mathbf{p}}$  por  $\boldsymbol{\pi}$  definido como

$$\boldsymbol{\pi} = \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U). \quad (3.14)$$

Na equação acima o termo  $\boldsymbol{\sigma}$  é um vetor cujas componentes cartesianas são as matrizes de Pauli [43, 44]. O cálculo mais detalhado assim como a natureza da interação spin-órbita e seus efeitos na estrutura eletrônica de estados confinados serão apresentados no capítulo 4.

O modelo mais básico para o cálculo da estrutura de bandas de um semicondutor é o modelo parabólico, tanto para a banda de valência ( $\boldsymbol{v}$ ) como para a banda de condução

(c). Neste caso assume-se o tensor de massa efetiva como isotrópico

$$\mathcal{E}_{c/v}(\mathbf{k}) = \pm \left( \frac{\mathcal{E}_g}{2} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_{(c/v)}^*} \right) \quad (3.15)$$

no qual,  $\mathbf{k}$  é o vetor de onda medido a partir do centro da zona de Brillouin,  $\mathcal{E}_g$  é a energia do “*gap*” e  $m_{c/v}^*$  são as massas efetivas da banda de condução e valência [30] neste ponto de simetria.

Para a banda de condução de semicondutores de “*gap*” largo ( $\mathcal{E}_g \geq 500$  meV), tal aproximação pode ser bastante razoável, e foi utilizada em nossa abordagem para o cálculo da estrutura eletrônica de elétrons em nanofios de *InP*. Porém, o tensor de massa efetiva na banda de valência nestes materiais semicondutores possui um marcado caráter anisotrópico, e tal aproximação não pode ser considerada. Por isso, aproximações mais complexas, que levam em consideração efeitos de não-parabolicidade, de anisotropia e de acoplamento entre buracos leves (LH) e buracos pesados (HH) fazem-se necessárias.

Como introduzido acima, esta descrição da estrutura eletrônica está baseada no teorema de Bloch e é aplicável a sistemas volumétricos (“*bulk*”) onde, devido à invariância translacional, as componentes do vetor (momento linear) de onda são bons números quânticos. Porém, sua abrangência se estende até os sistemas nanoscópicos onde as propriedades de simetria cristalinas ainda prevalecem, tais como poços quânticos, nanofios e pontos quânticos, e nestes sistemas, as componentes do vetor de onda (momento linear) tornam-se operadores diferenciais.

Para o estudo da banda de valência e, em particular, para a elucidação da natureza dos resultados mostrados na Fig. 3.1, usamos o modelo de Luttinger. [14] O sistema de equações (3.9) possui dimensão infinita e resulta impossível sua solução exata. Porém, nossa região de interesse se restringe apenas aos estados de energia nas proximidades de  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  e a aproximação  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  mostra-se adequada. Para tratarmos a equação (3.9), utilizamos o método desenvolvido por Löwdin [45], que abordou o problema via teoria de perturbação e diagonalização exata. Luttinger [14], usando esta abordagem, obteve um Hamiltoniano efetivo ( $\mathbf{H}_L$ ) levando em consideração apenas aspectos de simetria para o cálculo da banda de valência. [46] Nesse caso, a representação do Hamiltoniano



(3.9) na base dos autoestados do momento angular total  $|\mathbf{J}, m_J\rangle = |3/2, +3/2\rangle = \frac{1}{2}|(x+iy)\uparrow\rangle, |3/2, +1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|(x+iy)\downarrow - 2z\uparrow\rangle, |3/2, -3/2\rangle = \frac{1}{2}|(x-iy)\downarrow\rangle, |3/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|(x-iy)\uparrow + 2z\downarrow\rangle$  se escreve como

$$H_L \Psi_{n,p}(\rho, \theta, z) = \frac{\hbar^2}{m_0} \begin{pmatrix} D_{hh}^+ & A_- & 0 & B_- \\ & D_{lh}^+ & B_- & 0 \\ & & D_{hh}^- & A_+ \\ & & & D_{lh}^- \end{pmatrix} \sum_{n',p'} \begin{pmatrix} C_{1,n',p',k'_z} \Phi_{n',p',k'_z}(\rho, \theta, z) \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle \\ C_{2,n',p',k'_z} \Phi_{n',p',k'_z}(\rho, \theta, z) \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \\ C_{3,n',p',k'_z} \Phi_{n',p',k'_z}(\rho, \theta, z) \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ C_{4,n',p',k'_z} \Phi_{n',p',k'_z}(\rho, \theta, z) \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{pmatrix} \\ = \mathcal{E} \sum_{n',p'} \begin{pmatrix} C_{1,n',p',k'_z} \Phi_{n',p',k'_z}(\rho, \theta, z) \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle \\ C_{2,n',p',k'_z} \Phi_{n',p',k'_z}(\rho, \theta, z) \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \\ C_{3,n',p',k'_z} \Phi_{n',p',k'_z}(\rho, \theta, z) \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ C_{4,n',p',k'_z} \Phi_{n',p',k'_z}(\rho, \theta, z) \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

no qual

$$D_{hh}^\pm = - \left( \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) \{ \hat{k}_+, \hat{k}_- \} - \left( \frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2} \right) \hat{k}_z^2, \quad (3.17)$$

$$D_{lh}^\pm = - \left( \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2} \right) \{ \hat{k}_+, \hat{k}_- \} - \left( \frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2} \right) \hat{k}_z^2, \quad (3.18)$$

$$A_\pm = -\sqrt{3}\gamma_3 \hat{k}_\pm \hat{k}_z, \quad (3.19)$$

$$B_\pm = -\frac{\sqrt{3}\gamma_2 + \gamma_3}{2} \hat{k}_\pm^2, \quad (3.20)$$

onde  $\gamma_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ) são os parâmetros de Luttinger que determinam as anisotropias nas massas efetivas dos buracos e os acoplamentos entre os buracos leve e pesado,  $\{\mathbf{A}, \mathbf{B}\} = \frac{1}{2}(\mathbf{AB} + \mathbf{BA})$  e  $\hat{k}_\pm = \hat{k}_x \pm i\hat{k}_y$ . Os valores utilizados para o cálculo efetivo das bandas de valência de *InP* estão dispostos na tabela 3.1.

Tab. 3.1: Parâmetros de Luttinger, extraídos da referência [47].

$\gamma_1$	4.95
$\gamma_2$	1.65
$\gamma_3$	2.35

Para a aplicação em nanofios de simetria cilíndrica resulta mais conveniente usar coordenadas polares onde,

$$\hat{\mathbf{k}}_{\pm} = -ie^{\pm i\theta} \left( \frac{\partial}{\partial \rho} \pm \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} \right), \quad (3.21)$$

$$\hat{\mathbf{k}}_{\pm}^2 = e^{\pm 2i\theta} \left( -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \pm \frac{2i}{\rho^2} \mp \frac{2i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \quad (3.22)$$

e

$$\{\hat{\mathbf{k}}_+, \hat{\mathbf{k}}_-\} = - \left[ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right]. \quad (3.23)$$

Usamos condições de contorno de barreira infinita na borda do nanofio, adequados para os nanofios estudados aqui, em contato com o ar. Assim, podemos expandir a função de onda na base de autofunções de um cilindro infinito (coordenada  $z$  livre) de raio  $a$ , como

$$\Phi_{n,p,k_z}(\rho, \theta, z) = \frac{J_n\left(\frac{\mu_{np}\rho}{a}\right) e^{in\theta}}{\sqrt{\pi a} |J_{n+1}(\mu_{np})|} e^{ik_z z}, \quad (3.24)$$

no qual  $J_n$  são as funções de Bessel e  $\mu_{np}$  é o  $p$ -éssimo zero da função de Bessel de ordem  $n$ . Consideramos o autovalor do operador  $\hat{\mathbf{k}}_z$  um bom número quântico, uma vez que o potencial de confinamento só depende de  $\rho$  e  $\theta$ , o comutador  $[\hat{\mathbf{k}}_z, \mathbf{H}]$  é nulo. Assim, a equação de Schrödinger para o  $\mathbf{H}$  é o produto entre a parte referente ao plano e uma função de movimento livre ao longo de  $z$ .

Com todas estas considerações podemos fatorizar a função (3.24) omitindo a parte em  $z$ , a qual corresponde à uma onda plana. A próxima seção será dedicada ao cálculo dos elementos de matriz do Hamiltoniano de Luttinger, de acordo com a simetria do problema.

### 3.2 Cálculos dos elementos de matriz.

A dedução analítica dos elementos de matriz do Hamiltoniano de Luttinger na base de funções (3.24) foi uma das tarefas centrais desta dissertação. Obtivemos expressões que permitiram compactar a representação do Hamiltoniano e sua separação em subespaços de Hilbert ortogonais. Isto, além de facilitar a representação das autofunções, facilita a

aplicação de métodos numéricos para a diagonalização do problema de autovalores.

Os elementos de matriz calculados são compostos pelos termos:  $\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \{\hat{k}_+, \hat{k}_-\} | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle$ ,  $\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \hat{k}_\pm | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle$  e  $\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \hat{k}_\pm^2 | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle$ .

Assim, aplicamos os respectivos operadores (3.21), (3.22) e (3.23) na função de onda (3.24) após a mudança de variável  $\mathbf{x} = \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'} \boldsymbol{\rho} / \mathbf{a}$ , obtendo

$$\langle \{\hat{k}_+, \hat{k}_-\} | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle = \frac{ie^{n' i \theta}}{\sqrt{\pi} \mathbf{a} |J_{n'+1}(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'})|} \left( \frac{\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'}}{\mathbf{a}} \right)^2 [-J_{n'}(\mathbf{x})], \quad (3.25)$$

$$\hat{k}_\pm | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle = \frac{ie^{i\theta(n' \pm 1)}}{\sqrt{\pi} \mathbf{a} |J_{n'+1}(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'})|} \left( \frac{\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'}}{\mathbf{a}} \right) [\pm J_{n' \pm 1}(\mathbf{x})] \text{ e} \quad (3.26)$$

$$\hat{k}_\pm^2 | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle = \frac{e^{i\theta(n' \pm 2)}}{\sqrt{\pi} \mathbf{a} |J_{n'+1}(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'})|} \left( \frac{\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'}}{\mathbf{a}} \right)^2 [-J_{n' \pm 2}(\mathbf{x})]. \quad (3.27)$$

Em seguida, calculamos a integral no volume, ou seja, o elemento de matriz

$$\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \{\hat{k}_+, \hat{k}_-\} | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle = \frac{\mu_{\mathbf{n}, \mathbf{p}}^2}{\mathbf{a}^2} \delta_{\mathbf{n}', \mathbf{n}} \delta_{\mathbf{p}', \mathbf{p}}, \quad (3.28)$$

$$\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \hat{k}_\pm | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle = \mp \frac{2i}{\mathbf{a}} T_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'}^{\mathbf{n}, \mathbf{p}} \delta_{\mathbf{n}', \mathbf{n} \mp 1} \text{ e} \quad (3.29)$$

$$\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \hat{k}_\pm^2 | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle = \mp \frac{4(n \mp 1)}{\mathbf{a}^2} T_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'}^{\mathbf{n}, \mathbf{p}} \delta_{\mathbf{n}', \mathbf{n} \mp 2}, \quad (3.30)$$

no qual  $T_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'}^{\mathbf{n}, \mathbf{p}} = \frac{\mu_{\mathbf{n}, \mathbf{p}} / \mu_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'}}{(\mu_{\mathbf{n}, \mathbf{p}} / \mu_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'})^2 - 1}$ .

Podemos, assim, reescrever os elementos de matriz do Hamiltoniano na equação (3.16) como

$$\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | D_{hh}^\pm | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle = \left\{ - \left( \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \right) \frac{\mu_{\mathbf{n}, \mathbf{p}}^2}{\mathbf{a}^2} - \left( \frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2} \right) \hat{k}_z^2 \right\} \delta_{\mathbf{n}', \mathbf{n}} \delta_{\mathbf{p}', \mathbf{p}}, \quad (3.31)$$

$$\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | D_{ih}^\pm | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle = \left\{ - \left( \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2} \right) \frac{\mu_{\mathbf{n}, \mathbf{p}}^2}{\mathbf{a}^2} - \left( \frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2} \right) \hat{k}_z^2 \right\} \delta_{\mathbf{n}', \mathbf{n}} \delta_{\mathbf{p}', \mathbf{p}}, \quad (3.32)$$

$$\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | A_\pm | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle = \frac{2i}{\mathbf{a}} \sqrt{3} \gamma_3 T_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'}^{\mathbf{n}, \mathbf{p}} \hat{k}_z \delta_{\mathbf{n}', \mathbf{n} \mp 1}, \quad (3.33)$$

$$\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | B_\pm | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle = \mp \frac{4(n \mp 1)}{\mathbf{a}^2} \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} T_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'}^{\mathbf{n}, \mathbf{p}} \delta_{\mathbf{n}', \mathbf{n} \mp 2}. \quad (3.34)$$

No caso particular dos elementos de matriz dos termos  $B_{\pm}$ , nos deparamos com uma dificuldade. Dada as regras de seleção pelo número quântico  $n$  obtidas na equação (3.34), o denominador do termo  $T_{n',p}^{n,p}$ , quando  $p' = p$ , é nulo, aparecendo assim uma singularidade no cálculo. Este obstáculo é resolvido ao calcular analiticamente o limite

$$\lim_{n \rightarrow \mp 1} \{ \pm(n+1) T_{n\pm 2, p'}^{n,p} \} = 2\mu_{n,p}^2 \delta_{p',p}. \quad (3.35)$$

Obtemos então

$$\langle \pm 1, p | B_{\pm} | \mp 1, p' \rangle = \mp \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \mu_{\pm 1, p} \delta_{n', n \mp 2} \quad (3.36)$$

A análise das simetrias contidas nos resultados analíticos dos elementos de matriz, recém expostos, possibilitaram subdividirmos o espaço de Hilbert e encontrar regras de seleção precisas com relação ao número quântico angular  $n$ . Assim, a base pode ser reduzida e a equação (3.16) se transforma em

$$\begin{aligned} H_L \Psi_{n,p}(\rho, \theta) &= \frac{\hbar^2}{m_0} \begin{pmatrix} D_{hh}^+ & A_- & 0 & B_- \\ & D_{lh}^+ & B_- & 0 \\ & & D_{hh}^- & A_+ \\ & & & D_{lh}^- \end{pmatrix} \sum_{n,p} \begin{pmatrix} C_{1,n} \Phi_{n,p}(\rho, \theta) \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle \\ C_{2,n+1} \Phi_{n+1,p}(\rho, \theta) \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \\ C_{3,n+3} \Phi_{n+3,p}(\rho, \theta) \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ C_{4,n+2} \Phi_{n+2,p}(\rho, \theta) \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{pmatrix} \\ &= \mathcal{E} \sum_{n,p} \begin{pmatrix} C_{1,n} \Phi_{n,p}(\rho, \theta) \left| \frac{3}{2}, +\frac{3}{2} \right\rangle \\ C_{2,n+1} \Phi_{n+1,p}(\rho, \theta) \left| \frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \\ C_{3,n+3} \Phi_{n+3,p}(\rho, \theta) \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ C_{4,n+2} \Phi_{n+2,p}(\rho, \theta) \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{pmatrix}, \quad (3.37) \end{aligned}$$

tornando mais rápida e eficiente o cálculo da estrutura de bandas.

Como mencionado previamente, além da quantização, outros efeitos foram detectados experimentalmente e associados à presença de tensões (“*strain*”). Eles também contribuem para a estrutura eletrônica dos sistemas de fios quânticos e requerem sua inclusão dentro

do modelo de Hamiltoniano. Esses efeitos serão detalhados e incluídos na próxima seção.

### 3.3 Introdução dos efeitos de “strain”.

Levando em consideração as deformações da estrutura cristalina, devido às tensões observadas experimentalmente, devemos adicionar termos no Hamiltoniano  $\mathbf{H}_L$  que levam em conta esses efeitos. Os valores das posições dos topos das sub-bandas de valência são modificados por parâmetros associados aos potenciais de deformação. No caso de deformações biaxiais em estruturas crescidas ao longo da direção  $[001]$ , como é o caso dos nanofios estudados, os efeitos de tensões aparecem como deslocamentos dos topos das bandas [41].

Podemos usar preliminarmente um modelo de Hamiltoniano diagonal para compreender os principais efeitos da introdução dos termos de tensão. Assim, escrevemos os termos diagonais do Hamiltoniano  $\mathbf{H}_L$  deslocados pelas contribuições de “strain”

$$\mathbf{H}_L^D = \frac{\hbar^2}{m_0} \begin{pmatrix} D_{hh}^+ + \Delta E_{HH} & 0 & 0 & 0 \\ & D_{lh}^+ + \Delta E_{LH} & 0 & 0 \\ & & D_{hh}^- + \Delta E_{HH} & 0 \\ & & & D_{lh}^- + \Delta E_{LH} \end{pmatrix}.$$

Onde, para a sub-banda do HH o deslocamento é dado por,

$$\Delta E_{HH} = -P - Q,$$

e para o LH, por

$$\Delta E_{LH} = -P + Q + \frac{2(Q)^2}{\Delta_{SO}},$$

com  $P = 2(\mathbf{a}_v + \mathbf{a}_c) \left( \frac{c_{11} - c_{12}}{c_{11}} \right) \epsilon_{\parallel}$ ,  $Q = -b \left( \frac{c_{11} + 2c_{12}}{c_{11}} \right) \epsilon_{\parallel}$  e sendo  $\Delta_{SO}$  o “split-off” de spin-órbita. Os parâmetros necessários para o cálculo destes deslocamentos estão apresentados na tabela 3.2.

Os autovalores do Hamiltoniano  $\mathbf{H}_L^D$  estão representados na Fig. 3.3. Os níveis de energia sem os efeitos de tensão estão apresentados na Fig. 3.3(a), quando acrescentamos

Tab. 3.2: Parâmetros para  $\Delta E_{LH}$  e  $\Delta E_{HH}$ , extraídos das referências [15] e [16]

Potenciais de deformação (dyn cm <sup>-2</sup> )		Módulos elásticos (eV)		$\Delta_{SO}$ (eV)
$c_{11}$	$10.11 \times 10^{11}$	$a_c$	-7.0	0.108
$c_{12}$	$5.61 \times 10^{11}$	$a_v$	-0.6	
		b	-1.7	

os efeitos de “*strain*”, notamos um deslocamento negativo de energia tanto nos níveis de energia de LH quanto de HH (Fig. 3.3(b)). Sem tensões aplicadas, o estado fundamental da banda de valência possui um caráter de LH, enquanto a aplicação de uma tensão biaxial pode alterar este caráter.

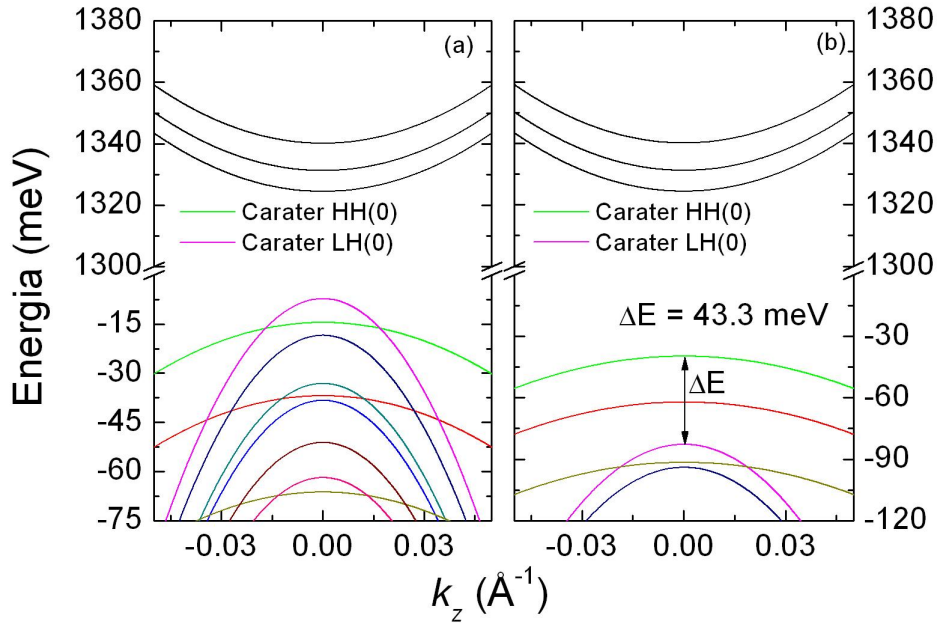


Fig. 3.3: Níveis de energia de um nanofio de *InP* de raio  $a = 100\text{\AA}$ . (a) sem efeitos de tensão, (b) com efeitos de tensão,  $\epsilon_{\parallel} = -0.9\%$ .

Esta análise preliminar ajuda a elucidar a fenomenologia dos efeitos de tensão antes de introduzir o acoplamento inter-bandas que modulará a estrutura dos níveis de energia.

### 3.4 Cálculo efetivo da banda de valência do nanofio de *InP*

Com toda esta fenomenologia e resultados analíticos para os elementos de matriz, montamos o Hamiltoniano completo,  $H_L$ . Os níveis de energia da banda de valência de

um nanofio de  $InP$  sem os efeitos de tensão são mostrados na Fig. 3.4(a).

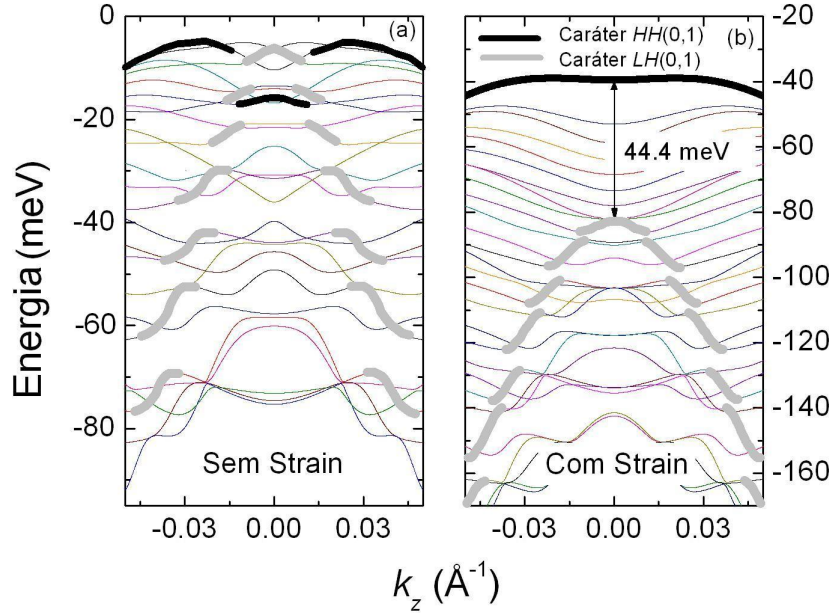


Fig. 3.4: Dispersões de energia para buracos leves e pesados em um nanofio de  $InP$  com raio  $a = 185\text{\AA}$ . Parte (a): não tensionado, (b): tensionado. [35]

Os resultados do cálculo dos níveis de energia de buracos em um fio quântico de  $InP$ , incluindo os efeitos de tensão, estão ilustrados na Fig. 3.4(b), onde usamos o valor  $\epsilon_{\parallel} = -0.9\%$  obtido experimentalmente via difração de elétrons. As separações, em  $k_z = 0$ , entre níveis de buracos leve e pesado com e sem tensão são respectivamente, em módulo, iguais à:  $|\Delta E_{LH}| = 73,87\text{ meV}$  e  $|\Delta E_{HH}| = 28,61\text{ meV}$ .

Através do cálculo dos coeficientes da expansão da função de onda, podemos identificar o caráter predominante dos estados da banda de valência. As linhas contínuas vermelhas da Fig. 3.5 representam os coeficientes com caráter predominante LH(0,1), em um nanofio não-tensionado. Os correspondentes estados estão demarcados em cinza na Fig. 3.4(a). As linhas tracejadas em preto referem-se aos coeficientes com caráter predominante HH(0,1) que correspondem a níveis de energia demarcados em preto na Fig. 3.4 (a).

Quando consideramos os efeitos de tensão, no cálculo dos coeficientes, temos um novo reordenamento nas energia dos estados fundamentais dos buracos. A Fig. 3.6 permite atribuímos o estado HH(0,1) a apenas um nível da banda de valência, representado pela linha preta na Fig. 3.4(b), enquanto os caráter LH(0,1) continua dividido entre vários

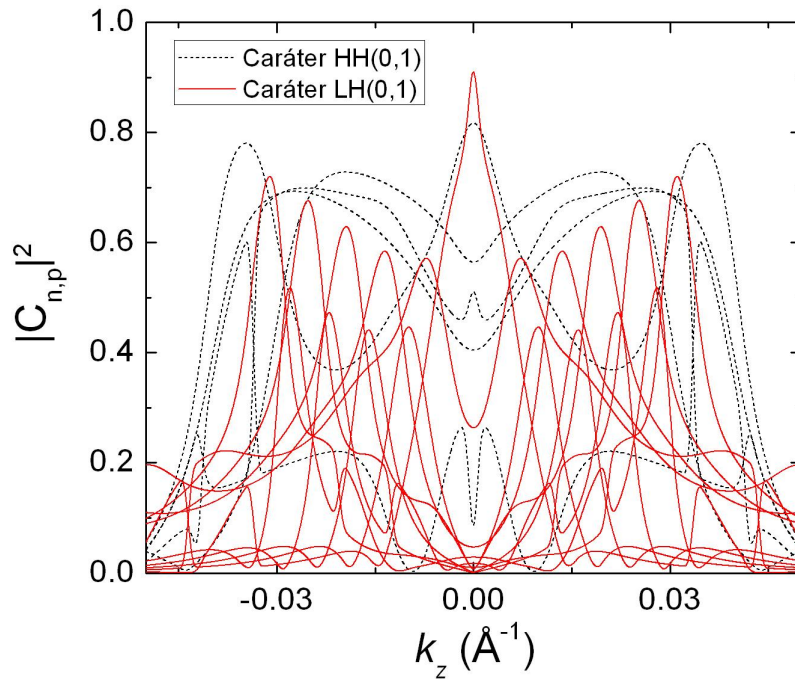


Fig. 3.5: Módulo quadrado dos coeficientes da expansão da função de onda que caracterizam o grau de hibridização do caráter dos estados de buraco, em função de  $k_z$  para estados sem “strain” com raio  $a = 185\text{Å}$ .

níveis, mostrados com linha cinza na Fig. 3.4(b).

Estes resultados mostram o efeito do confinamento num sistema quase-unidimensional. Na ausência de tensões, o estado fundamental da banda de valência tem marcado caráter LH na região próxima ao topo da banda. Esta propriedade diferencia estes sistemas das nanoestruturas quase-bi-dimensionais (poços quânticos), onde em geral, o estado fundamental é ocupado pelo HH. A explicação desta peculiaridade radical na anisotropia das massas efetivas da banda de valência, evidenciada nos elementos diagonais do Hamiltoniano de Luttinger, em particular nos termos descritos nas equações (3.31) e (3.32), referem-se às massas efetivas do HH e LH no plano transversal ao eixo do nanofio, dadas por  $1/(\gamma_1 + \gamma_2)$  e  $1/(\gamma_1 - \gamma_2)$ , respectivamente. Assim, o HH, tendo uma massa menor nesse plano, é mais sensível aos efeitos do confinamento, como mostram as Figs. 3.3(a) e 3.4(a). As tensões nos fios acabam provocando a inversão deste comportamento.

Analisando a dependência dos coeficientes que caracterizam a hibridização dos estados HH e LH, em relação a  $k_z$ , notamos a importância em estudar esses efeitos também como função do raio do nanofio (Fig. 3.7). Ao consideramos os efeitos de tensão, notamos que



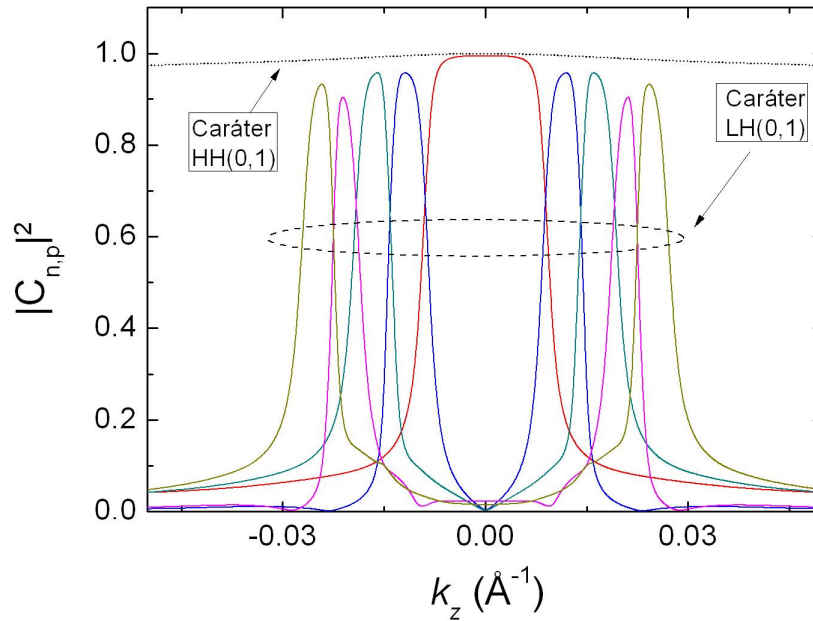


Fig. 3.6: Módulo quadrado dos coeficientes da expansão da função de onda que caracterizam o grau de hibridização do caráter dos estados de buraco, em função de  $k_z$  para estados tensionados com raio  $a = 185\text{\AA}$

para o raio médio de  $185\text{\AA}$  os caracteres, tanto de HH(0,1) quanto de LH(0,1), são de estados com um grau baixo de hibridização (Fig. 3.7(b)).

Analisando os estados com caracteres predominantemente HH e LH, notamos que a diferença de energia entre eles resulta  $\Delta E = 44.4$  meV. Este valor coincide com a diferença de energia dos picos B e C na Fig. 3.1. Este resultado permite associar os picos presentes no espectro de PL dos nanofios como a recombinação entre elétron e HH, no caso do pico B, e entre elétron e LH, para o pico C. [35]

O próximo passo será o cálculo das regras de seleção da emissão de luz. Isto permitirá elucidar a relação entre as intensidades provenientes de recombinações óticas para diferentes condições de detecção.

### 3.5 Regras de seleção da emissão de luz em nanofios semicondutores

Para modelar a emissão de luz, usamos a teoria de perturbações, que permite calcular a probabilidade de transição entre estados quânticos pela criação de fótons. De acordo com a referência [49], a interação de uma partícula sem spin, com massa  $\mathbf{m}$  e carga elétrica

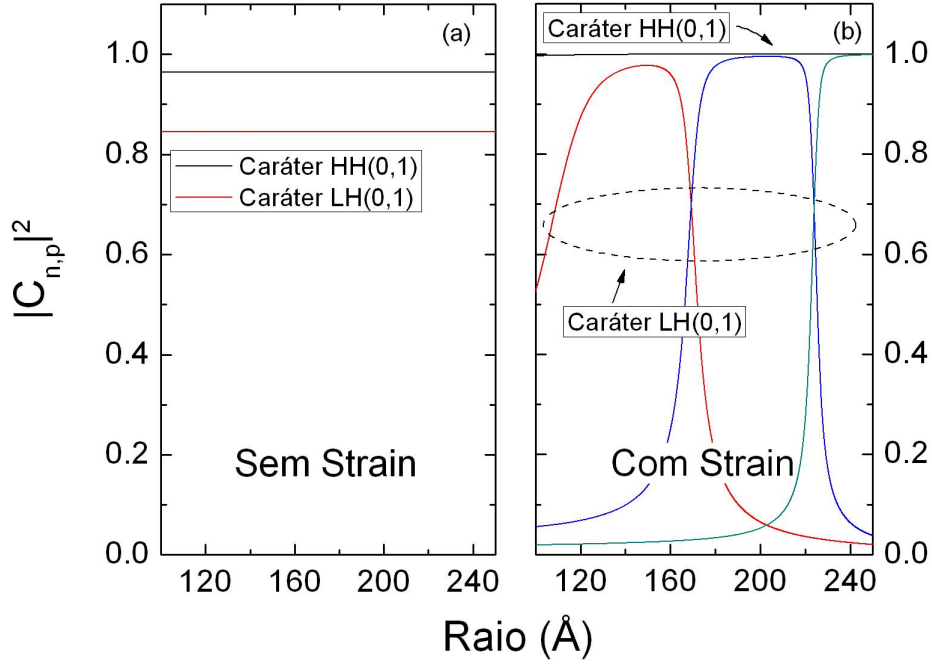


Fig. 3.7: Módulo quadrado dos coeficientes versus o raio do fio para  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ : (a) não-tensionado e (b) tensionado.

$\mathbf{e}$ , com um campo elétrico-magnético representado pelo potencial vetor  $\mathbf{A}$ , é da forma do operador

$$\hat{W}(t) = -\frac{e}{mc}(\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{\mathbf{A}}^2, \quad (3.38)$$

no qual  $\hat{\mathbf{A}}$  é o operador potencial vetor,  $\hat{\mathbf{p}}$  o operador momento linear da partícula e  $c$  a velocidade da luz no vácuo. Utilizando o método de teoria de perturbação para calcular a probabilidade de transição sobre a influência de um campo eletromagnético, consideramos uma expansão da probabilidade de transição em uma série de potências em parâmetros da interação (3.38). Em unidades adimensionais esse parâmetro será a constante de estrutura fina

$$\zeta = e^2/\hbar c \sim 1/137).$$

O fato de  $\zeta$  ser pequeno nos permite considerar apenas o primeiro termo da teoria de perturbação. Assim, a equação (3.38) terá apenas o primeiro termo

$$\hat{W}(t) = -\frac{e}{mc}(\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{\mathbf{A}}^2, \quad (3.39)$$

Podemos escrever o operador  $\hat{\mathbf{A}}$  em termos dos operadores criação ( $\hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger$ ) e aniquilação ( $\hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\alpha}$ ) [49] de fótons, como

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha, \mathbf{k}} \left( \frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k}) [\hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\alpha}(t) + \hat{\mathbf{a}}_{-\mathbf{k},\alpha}^\dagger(t)] \quad (3.40)$$

onde,  $\mathbf{k}$  é o vetor de onda e  $\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k})$  o vetor unitário para a polarização elétrica. A constante  $\alpha$  surge devido a condição

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}} = 0,$$

que garante que as ondas eletromagnéticas são transversais, ou seja, essa condição só é satisfeita se o vetor unitário de polarização for perpendicular ao vetor de onda ( $\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k}) = 0$ ). Assim, para cada  $\mathbf{k}$  escolhido há dois vetores possíveis que satisfazem essa condição, ou seja, o índice  $\alpha$  pode assumir dois valores.

Substituindo o operador (3.40), no operador de interação, equação (3.39), obtemos

$$\hat{W}(t) = -\frac{e}{mc} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left( \frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})} (\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}}) [\hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\alpha}(t) + \hat{\mathbf{a}}_{-\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t)]. \quad (3.41)$$

Na representação de Heisenberg, a dependência temporal dos operadores acima pode ser expressa como

$$i\hbar \frac{d\hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\alpha}}{dt} = [\hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\alpha}, \hat{H}]_- = \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\alpha}$$

onde,

$$\hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\alpha}(t) = \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\alpha}(0) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} \quad (3.42)$$

Feita a separação da parte temporal, iremos analisar a parte referente à emissão, ou criação, de um fóton  $\mathbf{k}_\alpha$ . Temos então que

$$\begin{aligned} \hat{W}^+(t) = \hat{w}^+ e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} &= -\frac{e}{mc} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left( \frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \times \\ &e^{i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})} (\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}}) \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}, \quad \omega = kc. \end{aligned} \quad (3.43)$$

O estado inicial completo do sistema é dado pela função de onda  $|int\rangle = |n_{\mathbf{k}\alpha}\rangle \phi_m$ . Ao

aplicarmos o operador criação na autofunção  $|\mathbf{n}_{\mathbf{k}\alpha}\rangle$ , que corresponde ao número de fótons no campo, obtemos o seguinte resultado

$$\hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger |\mathbf{n}_{\mathbf{k}\alpha}\rangle = (\mathbf{n}_{\mathbf{k}\alpha} + 1)^{\frac{1}{2}} |\mathbf{n}_{\mathbf{k}\alpha} + 1\rangle. \quad (3.44)$$

Assim, aplicando o operador interação nesse estado inicial obtemos um estado final,  $|\mathbf{fin}\rangle = |\mathbf{n}_{\mathbf{k}\alpha} + 1\rangle \phi_m$ .

$$\langle \mathbf{fin} | \hat{w}^+ | \mathbf{int} \rangle = -\frac{e}{\mathbf{m}\mathbf{c}} \left( \frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \langle \Psi_n | e^{i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})} \hat{\mathbf{p}} | \Psi_m \rangle (\mathbf{n}_{\mathbf{k}\alpha} + 1)^{\frac{1}{2}} \quad (3.45)$$

A probabilidade por unidade de tempo para o sistema emitir um fóton é dada por

$$\frac{dP_{nm}^+}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{fin} | \hat{w}^+ | \mathbf{int} \rangle|^2 \varrho(\mathcal{E}_{\mathbf{fin}}^+), \quad (3.46)$$

onde  $\varrho(\mathcal{E}_{\mathbf{fin}}^+)$  é a densidade de estados final. Considerando uma aproximação para grandes (pequenos) comprimentos (números) de onda, podemos expandir  $e^{i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})}$  em uma série de potências e considerar apenas o primeiro termo da série que é  $\mathbf{1}$ . Logo,

$$\langle \mathbf{n} | e^{i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})} \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{m} \rangle = \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{m} \rangle. \quad (3.47)$$

Podemos realizar a substituição do operador  $\hat{\mathbf{p}}$  pelo operador coordenada,  $\hat{\mathbf{r}}$ , através do Hamiltoniano  $\hat{\mathbf{H}}_0 = (\hat{\mathbf{p}})^2/2\mathbf{m} + \hat{U}(\mathbf{r})$ . Utilizando a relação de comutação entre os operadores momento e posição obtemos

$$\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{H}}_0 - \hat{\mathbf{H}}_0\hat{\mathbf{r}} = \frac{i\hbar}{\mathbf{m}}\hat{\mathbf{p}}.$$

Tomando os elementos de matriz dos dois lados desta equação e utilizando as autofunções do operador  $\hat{\mathbf{H}}_0$  temos

$$\frac{i\hbar}{\mathbf{m}} \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{m} \rangle = \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{H}}_0 - \hat{\mathbf{H}}_0\hat{\mathbf{r}} | \mathbf{m} \rangle = (\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n) \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{m} \rangle.$$

Assim, obtemos a seguinte relação

$$\langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{m} \rangle = \frac{i\mathbf{m}}{\hbar} (\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m) \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{m} \rangle. \quad (3.48)$$

Substituindo a relação (3.48) na equação (3.45) obtemos

$$\langle \mathbf{fin} | \hat{\mathbf{w}}^+ | \mathbf{int} \rangle = -i(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m) \left( \frac{2\pi\hbar[\mathbf{n}_{\mathbf{k}\alpha} + 1]}{V\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \langle \mathbf{n} | \mathbf{e}\hat{\mathbf{r}} | \mathbf{m} \rangle. \quad (3.49)$$

Na equação acima identificamos o vetor momento de dipolo elétrico da transição  $\mathbf{m} \rightarrow \mathbf{n}$ ,  $\mathbf{d}_{nm}$ , que corresponde a  $\langle \mathbf{n} | \mathbf{e}\hat{\mathbf{r}} | \mathbf{m} \rangle$ .

Para calcularmos a probabilidade por unidade de tempo (3.46) de emissão de um quantum de energia  $\hbar\omega$ , necessitamos apenas calcular a densidade de estados  $\varrho(\mathcal{E}_{fin}^+)$ , que corresponde à fração de estados finais,  $dN_p$ , por unidade de energia. Esse número é determinado pelos graus de liberdade do campo eletromagnético.

O número de estados do campo em um volume  $V$ , com uma polarização do fóton bem definida, com um valor absoluto do momento entre  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{p} + d\mathbf{p}$  em um determinado ângulo sólido, é determinada por

$$dN_p = \frac{V p^2 dp d\Omega}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (3.50)$$

Considerando as propriedades quânticas desse campo, no qual cada fóton com energia  $\mathcal{E} = \hbar\omega$  terá um momento  $\mathbf{p} = \mathcal{E}/c$ , resulta

$$dN_p = \frac{V \mathcal{E}^2 dp d\Omega}{c^2 (2\pi\hbar)^3}. \quad (3.51)$$

Como  $d\mathbf{p}/d\mathcal{E} = 1/c$ , a densidade de estados correspondente é

$$d\varrho(\mathcal{E}_{fin}^+) = \frac{dN_p}{d\mathcal{E}} = \frac{V \mathcal{E}^2 d\Omega}{(2\pi\hbar c)^3} \quad (3.52)$$

A probabilidade de transição ótica de um estado inicial para um estado final está sujeita a regras de seleção devido à forma do objeto tratado. De acordo com Kohn e Luttinger [38], como discutido previamente a função de onda de um elétron associado a uma rede

periódica cristalina,  $(\Psi_j(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z))$  é produto de uma função envelope  $(\Phi_{n,p,k_z}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z))$ , que varia lentamente dentro da célula unitária, por funções de Bloch  $(\mathbf{u}_{j0}(\mathbf{r}))$  invariantes por translações de um vetor gerador da rede  $\mathbf{T}$ , que variam rapidamente dentro dessa mesma célula,

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z) = \sum_i C_i^\beta(\mathbf{k}) \mathbf{u}_{j0}^i(\mathbf{r}) \Phi_{n,p,k_z}^i(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z) |\beta\rangle, \quad (3.53)$$

onde  $j$  é o índice que enumera as bandas e  $\Phi_{n,p,k_z}^i(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z)$  é a função (3.24) a menos da parte em  $z$  que corresponde à uma onda plana nessa direção.

Podemos interpretar o estado inicial como sendo referente a banda de valência e o estado final sendo a banda de condução e ambos possuindo funções do tipo 3.53. Então, podemos calcular o elemento matricial expresso na probabilidade de transição, equação (3.45), desse sistema.

$$\langle c | \hat{w}^+ | v \rangle = -\frac{e}{mc} \left( \frac{2\pi\hbar c^2 (n_{k\alpha} + 1)}{V\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i C_i(\mathbf{k}) \beta_{j\alpha}(\mathbf{k}) \cdot \int \mathbf{u}_{c0}^*(\mathbf{r}) \Phi_{n,p,k_z}^*(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z) \times \\ [e^{i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})} \hat{\mathbf{p}}] \mathbf{u}_{v0}(\mathbf{r}) \Phi_{n',p',k'_z}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z) d^3\mathbf{r} \quad (3.54)$$

Logo, obtemos o resultado da aplicação do operador  $[e^{i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})} \hat{\mathbf{p}}]$  nas duas funções que constituem o vetor de estado do sistema,

$$e^{i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})} (-i\hbar) \nabla \mathbf{u}_{v0}(\mathbf{r}) \Phi_{n',p',k'_z}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z) + \mathbf{u}_{v0}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})} (-i\hbar) \nabla \Phi_{n',p',k'_z}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z) = \\ [e^{i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})} \hat{\mathbf{p}}] \mathbf{u}_{v0}(\mathbf{r}) \Phi_{n',p',k'_z}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z) + \mathbf{u}_{v0}(\mathbf{r}) [e^{i(\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}})} \hat{\mathbf{p}}] \Phi_{n',p',k'_z}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z). \quad (3.55)$$

Substituindo o operador (3.55) na equação (3.54)

$$\langle c | \hat{w}^+ | v \rangle = -\frac{e}{mc} \left( \frac{2\pi\hbar c^2 (n_{k\alpha} + 1)}{V\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i C_i^\beta(\mathbf{k}) \mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \\ \left[ \int \Phi_{n,p,k_z}^*(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z) \Phi_{n',p',k'_z}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta}, z) \mathbf{u}_{c0}^*(\mathbf{r}) [e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \hat{\mathbf{p}} \mathbf{u}_{v0}(\mathbf{r})] d^3\mathbf{r} + \right.$$

$$\int \Phi_{n,p,k_z}^* (\rho, \theta, z) [e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \hat{\mathbf{p}} \Phi_{n',p',k'_z} (\rho, \theta, z)] \mathbf{u}_{c0}^* (\mathbf{r}) \mathbf{u}_{v0} (\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (3.56)$$

O primeiro termo da expansão acima refere-se às transições interbandas enquanto o segundo às transições intrabandas. Como só estamos considerando materiais semicondutores não-dopados e as transições entre banda de valência e condução, não trataremos o último tipo.

$$\langle c | \hat{w}^+ | v \rangle = -\frac{e}{\mathbf{m}c} \left( \frac{2\pi \hbar c^2 (n_{k\alpha} + 1)}{V\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i C_i^\beta (\mathbf{k}) \mathbf{j}_\alpha (\mathbf{k}).$$

$$\left[ \int \Phi_{n,p,k_z}^* (\rho, \theta, z) \Phi_{n',p',k'_z} (\rho, \theta, z) \mathbf{u}_{c0}^* (\mathbf{r}) [e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \hat{\mathbf{p}} \mathbf{u}_{v0} (\mathbf{r})] d^3 \mathbf{r} \right] \quad (3.57)$$

Como o nanofio consiste de um arranjo periódico de células unitárias, essa integração pode se decompor através de seu número total ( $Z$ ) tomadas no volume da própria célula unitária ( $\Omega_0$ ) [39], ou seja,

$$\langle c | \hat{w}^+ | v \rangle = -\frac{e}{\mathbf{m}c} \left( \frac{2\pi \hbar c^2 (n_{k\alpha} + 1)}{V\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i C_i^\beta (\mathbf{k}) \mathbf{j}_\alpha (\mathbf{k}).$$

$$\sum_Z \left[ \int_{\Omega_0} \Phi_{n,p,k_z}^* (\rho, \theta, z) \Phi_{n',p',k'_z} (\rho, \theta, z) \mathbf{u}_{c0}^* (\mathbf{r}) [e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \hat{\mathbf{p}} \mathbf{u}_{v0} (\mathbf{r})] d^3 \mathbf{r} \right] \quad (3.58)$$

As funções de variação lenta dentro da célula, ou seja, a função envelope e o potencial vetor, assim como seus correspondentes, podem ser retiradas da integral, logo

$$\langle c | \hat{w}^+ | v \rangle = -\frac{e}{\mathbf{m}c} \left( \frac{2\pi \hbar c^2 (n_{k\alpha} + 1)}{V\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i C_i^\beta (\mathbf{k}) \mathbf{j}_\alpha (\mathbf{k}) \cdot \frac{1}{\Omega_0} \times \int_{\Omega_0} \mathbf{u}_{c0}^* (\mathbf{r}) (e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \hat{\mathbf{p}} \mathbf{u}_{v0} (\mathbf{r})) d^3 \mathbf{r} \sum_Z \Phi_{n,p,k_z}^* (\rho, \theta, z) \Phi_{n',p',k'_z} (\rho, \theta, z) \Omega_0. \quad (3.59)$$

Essa última soma nada mais é que a integral em todo o volume ( $V$ ) do nanofio

$$\langle c | \hat{w}^+ | v \rangle = -\frac{e}{\mathbf{m}c} \left( \frac{2\pi \hbar c^2 (n_{k\alpha} + 1)}{V\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i C_i^\beta (\mathbf{k}) \mathbf{j}_\alpha (\mathbf{k}) \cdot \frac{1}{\Omega_0} \times$$

$$\int_{\Omega_0} \mathbf{u}_{c0}^*(\mathbf{r})(e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}\hat{\mathbf{p}}\mathbf{u}_{v0}(\mathbf{r}))d^3\mathbf{r} \int_V \Phi_{n,p,k_z}^*(\rho, \theta, z)\Phi_{n',p',k'_z}(\rho, \theta, z)\rho d\rho d\theta dz. \quad (3.60)$$

Considerando a aproximação para grandes (pequenos) comprimentos (números) de onda, onde o vetor de onda incidente  $\mathbf{k}$  é nulo e substituindo as funções envelopes (3.24) na equação acima podemos calcular as regras de seleção para as transições interbandas. Assim, realizando o cálculo da integral volumétrica das funções envelope, que são ortogonais,

$$\begin{aligned} & \int_V \Phi_{n,p,k_z}^*(\rho, \theta, z)\Phi_{n',p',k'_z}(\rho, \theta, z)\rho d\rho d\theta dz = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^a \frac{J_n\left(\frac{\mu_{np}\rho}{a}\right) e^{-in\theta} e^{-ik_z z}}{\sqrt{\pi}a|J_{n+1}(\mu_{np})|} \frac{J_{n'}\left(\frac{\mu_{n'p'}\rho}{a}\right) e^{in'\theta} e^{ik'_z z}}{\sqrt{\pi}a|J_{n'+1}(\mu_{n'p'})|} \rho d\rho d\theta dz = \\ &= \partial(k'_z - k_z)\delta_{n',n}\delta_{p',p}. \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} \langle c|\hat{w}^+|v\rangle &= -\frac{e}{mc} \left( \frac{2\pi\hbar c^2(n_{k\alpha} + 1)}{V\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Omega_0} \sum_i C_i^\beta(\mathbf{k}) \times \\ & \int_{\Omega_0} \mathbf{u}_{c0}^*(\mathbf{r})[\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}}\mathbf{u}_{v0}(\mathbf{r})]d^3\mathbf{r} \partial(k'_z - k_z)\delta_{n',n}\delta_{p',p}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

O termo  $\frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} \mathbf{u}_{c0}^*(\mathbf{r})[\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}}\mathbf{u}_{v0}(\mathbf{r})]d^3\mathbf{r} = \langle \mathbf{u}_{c0}|\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{u}_{v0}\rangle$  da equação acima, como dito anteriormente, define as regras de seleção para as transições interbandas entre as funções de Bloch expandidas na base usada no Hamiltoniano de Luttinger.

Considerando dois casos de polarização da luz emitida com polarização na direção  $\mathbf{z}$  ou  $\mathbf{x}$  (equivalente a  $\mathbf{y}$ ), podemos determinar essas regras de transição.

Para o primeiro caso temos

$$\langle S \uparrow | \hat{z} \cdot \hat{\mathbf{p}} | HH \uparrow \rangle = \langle S \uparrow | \hat{p}_z | -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy, 0) \rangle = 0 \quad (3.62)$$

$$\langle S \uparrow | \hat{z} \cdot \hat{\mathbf{p}} | LH \uparrow \rangle = \langle S \uparrow | \hat{z} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \frac{1}{\sqrt{6}}(2z, -x - iy) \rangle = \frac{2}{\sqrt{6}}\mathbb{P} \quad (3.63)$$



$$\langle S \downarrow | \hat{z} \cdot \hat{p} | HH \downarrow \rangle = \langle S \downarrow | \hat{p}_z | -\frac{1}{\sqrt{2}}(0, x - iy) \rangle = 0 \quad (3.64)$$

$$\langle S \downarrow | \hat{z} \cdot \hat{p} | LH \downarrow \rangle = \langle S \downarrow | \hat{z} \cdot \hat{p} | \frac{1}{\sqrt{6}}(x - iy, 2z) \rangle = \frac{2}{\sqrt{6}}\mathbb{P}, \quad (3.65)$$

com  $\mathbb{P} = \langle S | \hat{p}_z | z \rangle = \langle S | \hat{p}_x | x \rangle$ , ou seja, para uma polarização desse tipo há transições apenas envolvendo estados com caráter de buraco leve (LH).

Para o caso com polarização da luz na direção  $x$ , temos

$$\langle S \uparrow | \hat{x} \cdot \hat{p} | HH \uparrow \rangle = \langle S \uparrow | \hat{p}_x | -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy, 0) \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}\mathbb{P} \quad (3.66)$$

$$\langle S \uparrow | \hat{x} \cdot \hat{p} | LH \uparrow \rangle = \langle S \uparrow | \hat{x} \cdot \hat{p} | \frac{1}{\sqrt{6}}(2z, -x - iy) \rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}}\mathbb{P} \quad (3.67)$$

$$\langle S \downarrow | \hat{x} \cdot \hat{p} | HH \downarrow \rangle = \langle S \downarrow | \hat{p}_x | -\frac{1}{\sqrt{2}}(0, x - iy) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbb{P} \quad (3.68)$$

$$\langle S \downarrow | \hat{x} \cdot \hat{p} | LH \downarrow \rangle = \langle S \downarrow | \hat{x} \cdot \hat{p} | \frac{1}{\sqrt{6}}(x - iy, 2z) \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\mathbb{P}. \quad (3.69)$$

Neste caso, as transições possíveis podem envolver estados com caráter tanto de buraco leve (LH) quanto de buraco pesado (HH).

Os valores dos picos de intensidade são provenientes dos pesos atribuídos para cada transição permitida, como calculada anteriormente. Para a condição de excitação na direção  $z$  temos um valor de intensidade, correspondente ao LH, de  $\frac{2}{3}$ . Quando a excitação é na direção  $x$  as transições permitidas são provenientes tanto do LH quanto do HH. Para o primeiro o pico de intensidade possui o valor de  $\frac{1}{6}$ , para o segundo o valor de  $\frac{1}{2}$ .

Esse estudo torna possível a caracterização da detecção de luz polarizada em ambas direções de polarização,  $x$  e  $z$ , qualquer que seja a condição de excitação, fato esse que seria impossível verificar com a abordagem clássica. Os valores obtidos para os picos de intensidades ainda não correspondem exatamente ao experimento, isso devido à estarmos levando em consideração apenas a contribuição em  $\mathbf{k}_z = \mathbf{0}$ . Sabemos que há contribuição dos demais valores de  $\mathbf{k}_z$  e este será tema de estudos futuros.

Na análise quântica apresentada para as propriedades óticas, a banda de condução foi tratada na aproximação parabólica. Porém os resultados analíticos obtidos para os

elementos de matriz do Hamiltoniano da banda de valência podem ser diretamente aplicados ao cálculo de efeitos da interação spin-órbita na banda de condução de sistemas com simetria cilíndrica. Este será o próximo passo a ser abordado.

## 4. EFEITOS DE SPIN EM NANOFIOS: INTERAÇÃO SPIN-ÓRBITA

Apesar da simplicidade do tratamento dado à banda de condução usando uma aproximação parabólica, existem efeitos importantes que podem ser introduzidos além desta aproximação. Dentre eles, escolhemos para este projeto, a introdução da interação spin-órbita para a estrutura eletrônica de nanofios semicondutores.

Esse efeito dinâmico, de origem relativística, está associado ao momento de dipolo magnético do spin do elétron ( $\boldsymbol{\mu}_s$ ) e o campo magnético interno do próprio átomo ( $\mathbf{B}$ ). Esse campo magnético é consequência do momento angular orbital do elétron em torno do núcleo. Ao levarmos em conta esse tipo de interação, temos a introdução de uma estrutura fina que desdobra os níveis degenerados de spin, fazendo com que as energias desses estados sejam ligeiramente diferentes. [50]

### 4.1 Natureza da interação spin-órbita

Podemos ajudar a compreender a natureza da interação spin-órbita através de um tratamento simplificado clássico do átomo de um elétron (Fig. 4.1). Com o referencial inercial situado no núcleo, temos o elétron orbitando em torno desse (Fig. 4.1(a)). Do ponto de vista do elétron (referencial fixo no elétron), temos o núcleo orbitando ao seu redor (Fig. 4.1(b)). Assim, o elétron fica sujeito a um campo magnético ( $\mathbf{B}$ ) proveniente do elemento de corrente ( $\mathbf{j}$ ) do núcleo carregado movendo-se circularmente com velocidade  $-\mathbf{v}$ .

Podemos calcular efetivamente esse  $\mathbf{B}$  através da Lei de Ampère

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{j} \times \mathbf{r}}{r^3} \quad (4.1)$$

Sabendo que  $\mathbf{j} = -Ze\mathbf{v}$  e  $\mathbf{E} = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r^3}$ , conseqüentemente  $\mathbf{r} = \frac{4\pi\epsilon_0 r^3}{Ze} \mathbf{E}$ , podemos

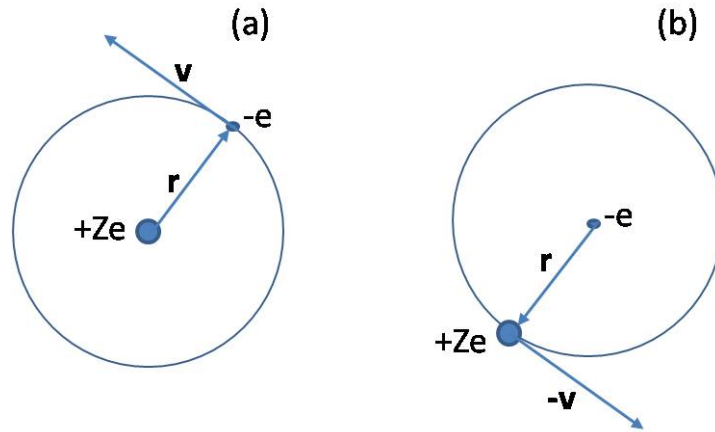


Fig. 4.1: (a) Movimento de um elétron em torno do núcleo. (b) Movimento no referencial do elétron.

substituí-los na equação acima e obter

$$\mathbf{B} = -\varepsilon_0\mu_0\mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c^2}\mathbf{v} \times \mathbf{E}, \quad (4.2)$$

onde  $\mathbf{E}$  é o campo elétrico gerado por essa carga nuclear e  $c$  a velocidade da luz, com  $c^2 = 1/\varepsilon_0\mu_0$ . A equação (4.2) descreve o efeito do movimento de um elétron com velocidade  $\mathbf{v}$  em um campo eletromagnético.

Substituindo apenas  $\mathbf{j}$  na equação (4.1), obtemos

$$\mathbf{B} = -\frac{Ze\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3}. \quad (4.3)$$

Temos que o momento angular orbital  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m_0\mathbf{v} = -m_0\mathbf{v} \times \mathbf{r}$ . Assim, podemos reescrever a equação (4.3) em termos de  $\mathbf{L}$ ,  $c$  e  $\varepsilon_0$ , ou seja,

$$\mathbf{B} = \frac{Ze\mu_0}{m_04\pi} \frac{\mathbf{r} \times m_0\mathbf{v}}{r^3} = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\mathbf{L}}{m_0c^2r^3}. \quad (4.4)$$

O elétron possui um momento magnético intrínseco ( $\mu_s$  que assume valores quantizados  $\pm\mu_B$  ao longo de um eixo de quantização, no qual  $\mu_B$  é o magneton de Bohr). Essa grandeza sugere a existência de um novo número quântico  $\sigma$  cujos valores assumidos podem ser  $\pm 1$ . A interação do  $\mu_s$  com o campo  $\mathbf{B}$  resulta em uma energia potencial ( $\Delta E_{so}$ ), que depende do ângulo de orientação entre estes vetores. Analogamente ao

cálculo da energia de um momento de dipolo qualquer na presença de um campo magnético [50], temos

$$\Delta E_{so} = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = -\frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{L}}{m_0 c^2 r^3}. \quad (4.5)$$

A equação acima viola a condição da conservação do momento angular, uma vez que  $\mathbf{L}$  não comuta com o Hamiltoniano. Para recuperarmos essa condição, o elétron deve possuir um momento angular intrínseco ( $\mathbf{S}$ ). Analogamente ao momento orbital,  $\boldsymbol{\mu}_s$  deve ser proporcional à  $\mathbf{S}$ . Logo,  $\boldsymbol{\mu}_s = -g_s \mu_B \mathbf{S} / \hbar$ , onde  $g_s = 2$  e  $\mu_B = e\hbar/2m_0c$ . Assim,

$$\Delta E_{so} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{m_0^2 c^3 r^3}. \quad (4.6)$$

A quantização do  $\boldsymbol{\mu}_s$  em dois valores sugere que a função de onda do elétron é representada por dois spinores

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Qualquer operador representado por uma matriz  $2 \times 2$  pode ser escrito como a combinação da matriz identidade  $\mathbb{I}$  e das matrizes de Pauli ( $\boldsymbol{\sigma}_1$ ,  $\boldsymbol{\sigma}_2$  e  $\boldsymbol{\sigma}_3$ ).

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Em particular, qualquer operador vetorial é necessariamente proporcional a  $\boldsymbol{\sigma} = (\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\sigma}_3)$ .

Logo, sendo  $\mathbf{S}$  um operador vetorial no espaço dos spins ele deve ser um múltiplo de  $\boldsymbol{\sigma}$ ,

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.7)$$

Substituindo este na equação (4.6) obtemos o termo da interação spin-órbita deduzido a partir de princípios clássicos.

$$\Delta E_{so} = \frac{Ze^2 \hbar}{8\pi\epsilon_0} \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}}{m_0^2 c^3 r^3}. \quad (4.8)$$

Todo esse cálculo desenvolvido levou em consideração que o elétron estava em um refe-

referencial inercial, porém, o problema inicial propõe o referencial fixo no núcleo. Essa transformação, que nada mais resulta em uma transformação de velocidades, deve acrescentar um termo puramente de origem cinética. Sabendo que o elétron apresenta movimento acelerado, temos uma mudança constante do referencial. Essa constante de mudança adiciona ao termo SO uma precessão, denominado precessão de Thomas, que resulta na metade do valor encontrado na equação (4.8).

A natureza do acoplamento SO descrita apresenta bom argumentos físicos. Porém, para ser concebida, ela alternou e se ajustou às teorias clássicas, quânticas e relativísticas. Uma maneira alternativa e mais satisfatória de obter esse mesmo resultado parte da equação de Dirac no limite não-relativístico. Ao explorarmos esse procedimento chegaremos na equação de Pauli que nos fornecerá o termo a ser acrescentado no Hamiltoniano para elétrons nas bandas de energia de um semiconductor.

#### 4.1.1 Acoplamento spin-órbita a partir da equação de Dirac

Como veremos, o acoplamento spin-órbita afeta profundamente a estrutura de bandas. Com a interação spin-órbita sendo levada em consideração, o operador  $\hat{\mathbf{p}}$ , da equação (3.9), é substituído pelo operador  $\boldsymbol{\pi}$ , equação (3.14).

Na física atômica, a interação spin-órbita é inserida no Hamiltoniano do sistema através da aproximação não-relativística da equação de Dirac,  $\mathbf{H}|\psi\rangle = \mathbf{E}|\psi\rangle$ , onde [30, 48]

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ c\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m_0c^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -m_0c^2 \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

Escrevendo o vetor de estado com duas componentes ( $\psi_A, \psi_B$ ) teremos duas equações acopladas. Eliminando o  $\psi_B$  através da combinação das duas equações obtemos

$$\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\frac{c^2}{\mathbf{E} + m_0c^2}\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\psi_A = (\mathbf{E} - m_0c^2)\psi_A. \quad (4.10)$$

Se levarmos em consideração a presença de um potencial, teremos que substituir  $\mathbf{E}$  por  $\mathbf{E} - \mathbf{V}$ . Assim, assumindo o limite não-relativístico teremos que  $\mathbf{E} = m_0c^2 + \epsilon$ , com

$\epsilon \ll m_0 c^2$ . Além disso, assumindo que  $|V| \ll m_0 c^2$  podemos expandir

$$\frac{c^2}{E - V + m_0 c^2} = \frac{1}{2m_0} \left( 1 - \frac{\epsilon - V}{2m_0 c^2} + \dots \right). \quad (4.11)$$

Podemos interpretar  $\epsilon$  como sendo a energia clássica da partícula, ou seja,  $\epsilon \sim m_0 v^2/2 + V$ . Assim, o segundo termo da expansão será da ordem de  $(v/c)^2$ . Usando a propriedade  $(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = p^2$  obtemos da última equação a equação de Schrödinger

$$\left( \frac{p^2}{2m_0} + V \right) \psi_A = \epsilon \psi_A. \quad (4.12)$$

Quando consideramos outras ordens de grandeza alguns cuidados devem ser tomados. A interpretação probabilística da teoria de Dirac requer uma normalização,

$$\int (\psi_A^\dagger \psi_A + \psi_B^\dagger \psi_B) = 1. \quad (4.13)$$

Na aproximação de primeira ordem, temos que

$$\int \psi_A^\dagger \left( 1 + \frac{p^2}{4m_0^2 c^2} \psi_A \right) = 1, \quad (4.14)$$

cuja normalização nos fornece uma função de onda  $\psi = [1 + p^2/8m_0^2 c^2]$ . Substituindo essa na equação de Dirac, usando a expansão (4.11), obtemos a equação de Pauli, onde o Hamiltoniano de spin-órbita é

$$H_{SO} = -\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times (\nabla U) \quad (4.15)$$

Da mesma maneira, incluindo esta interação na equação de dispersão (3.9), ou seja, substituindo o operador  $\hat{\mathbf{p}}$  pelo operador  $\boldsymbol{\pi}$ , obtemos a mesma equação de Pauli de dispersão

$$\sum_{m, \sigma'} \left[ \left( \mathcal{E}_{n0} - \mathcal{E}_{nk} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{nm} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\hbar k}{2m_0} \langle n\sigma | \boldsymbol{\pi} | m\sigma' \rangle + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \langle n\sigma | \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U | m\sigma' \rangle \right] C_{m, \sigma'}(\mathbf{k}) = 0. \quad (4.16)$$

A diagonalização do termo acima nos permite a descrição das bandas de energia com acoplamento spin-órbita. Sabemos que a aproximação parabólica é a mais simples aproximação que descreve a estrutura de bandas de elétrons, porém, nos fornece resultados interessantes quanto à natureza dessa interação. Novamente, nossa região de interesse restringe-se à vizinhança de  $\mathbf{k}_z = \mathbf{0}$ . Com isso, utilizaremos o Hamiltoniano desenvolvido por Dresselhaus [30] para o cálculo da estrutura eletrônica da banda de condução.

Consideramos termos no acoplamento spin-órbita até terceira ordem, esse acoplamento quebra a degenerescência dos estados de spin. Podemos então, escrever o Hamiltoniano da banda de condução, incluindo os termos Dresselhaus de acoplamento, como

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_D = \left[ \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} + U(\mathbf{r}, z) \right] \mathbf{I} + \mathbf{H}_D \quad (4.17)$$

onde podemos separar  $\mathbf{H}_D$  em três contribuições:

$$\mathbf{H}_D = \frac{\hbar^2 \mathbf{a}}{2m^*} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{2D} & \mathbf{H}_{1D} + \mathbf{H}_{3D} \\ \mathbf{H}_{1D}^\dagger + \mathbf{H}_{3D}^\dagger & -\mathbf{H}_{2D} \end{pmatrix}$$

no qual  $\mathbf{H}_{1D} = -\gamma_D \mathbf{k}_z^2 \mathbf{k}_-$ ,  $\mathbf{H}_{2D} = -\frac{1}{2} \gamma_D \mathbf{k}_z^2 (\mathbf{k}_-^2 + \mathbf{k}_+^2)$  e  $\mathbf{H}_{3D} = -\frac{1}{8} \gamma_D \{ \mathbf{k}_+, (\mathbf{k}_+^2 - \mathbf{k}_-^2) \}$ , sendo  $\gamma_D = 2m^* \beta / a \hbar^2$  [30], onde  $\beta$  é o parâmetro de interação SO e  $\mathbf{a}$  é o raio. Os elementos de matriz dos termos  $\mathbf{k}_\pm$  e  $\mathbf{k}_\pm^2$  já foram descritos no capítulo anterior, ao calcularmos a banda de valência do nanofio de *InP*. A próxima seção será dedicada ao cálculo dos termos cúbicos.

## 4.2 Cálculos dos elementos cúbicos de matriz.

Neste tópico calculamos a estrutura eletrônica de um nanofio semiconductor com simetria tipo blenda de zinco, que inclui o acoplamento spin-órbita devido aos termos de Dresselhaus [20] nos termos do Hamiltoniano para a banda de condução. Para isso efetuamos o cálculo analítico desses elementos. Os termos cúbicos calculados foram  $\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \hat{\mathbf{k}}_-^3 | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle$ ,  $\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \hat{\mathbf{k}}_+^3 | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle$ ,  $\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \hat{\mathbf{k}}_+ \hat{\mathbf{k}}_-^2 | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle$ ,  $\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \hat{\mathbf{k}}_- \hat{\mathbf{k}}_+^2 | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle$ ,  $\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \hat{\mathbf{k}}_+^2 \hat{\mathbf{k}}_- | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle$  e  $\langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \hat{\mathbf{k}}_-^2 \hat{\mathbf{k}}_+ | \mathbf{n}', \mathbf{p}' \rangle$ . Usando o cálculo dos elementos de matriz da banda de valência,



ilustrado na seção (3.2), obtemos os resultados da aplicação dos operadores quadráticos (3.22) na função de onda (3.24),

$$\hat{k}_{\pm}^2 |n', p'\rangle = \frac{e^{\pm 2i\theta} e^{in'\theta}}{\sqrt{\pi} a |J_{n'+1}(\mu_{n'p'})|} \left( \frac{\mu_{n'p'}}{a} \right)^2 \left[ -J_{n'\pm 2} \left( \frac{\mu_{n'p'}}{a} \right) \right]. \quad (4.18)$$

Assim, primeiramente, aplicamos os operadores lineares, equação (3.21), que constituem os elementos a serem calculados. Usando a mudança de variável  $\mathbf{x} = \frac{\mu_{n'm'}\rho}{a}$  obtemos,

$$\hat{k}_{\pm}^3 |n', p'\rangle = \mp \frac{ie^{i\theta(\pm 3+n')}}{\sqrt{\pi} a |J_{n'+1}(\mu_{n'p'})|} \left( \frac{\mu_{n'p'}}{a} \right)^3 [J_{n'\pm 3}(\mathbf{x})], \quad (4.19)$$

$$\hat{k}_{\pm} \hat{k}_{\mp}^2 |n', p'\rangle = \mp \frac{ie^{i\theta(\mp 1+n')}}{\sqrt{\pi} a |J_{n'+1}(\mu_{n'p'})|} \left( \frac{\mu_{n'p'}}{a} \right)^3 [J_{n'\mp 1}(\mathbf{x})] \text{ e} \quad (4.20)$$

$$\hat{k}_{\pm}^2 \hat{k}_{\mp} |n', p'\rangle = \frac{ie^{i\theta(\pm 1+n')}}{\sqrt{\pi} a |J_{n'+1}(\mu_{n'p'})|} \left( \frac{\mu_{n'p'}}{a} \right)^3 [J_{n'\pm 1}(\mathbf{x})]. \quad (4.21)$$

Por fim, calculamos os elementos de ordem cúbica que geraram regras de acoplamento ou conectividade referentes ao acoplamento entre o número quântico principal ( $\mathbf{n}$ ),

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{n}, \mathbf{p} | \{ \hat{k}_{\pm}, (\hat{k}_{+}^2 - \hat{k}_{-}^2) \} | n', p' \rangle &= \mp \frac{i}{a^3} T_{n',p'}^{n,p} \{ 2\mu_{n',p'}^2 \delta_{n',n\mp 1} \} + \\ &\frac{1}{a^3} [4(n' \pm 1)(n', \pm 2) - \mu_{n,p}^2] \delta_{n',n\mp 3}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Nota-se que cada contribuição dos três termos Dresselhaus causam diferentes misturas entre os números quânticos  $\mathbf{n}$  e  $\mathbf{p}$  das componentes “*spin-up*” e “*spin-down*” do estado de elétrons. Os termos linear e cúbico acoplam estados com diferente spin, cujas regras de acoplamentos são respectivamente  $\Delta \mathbf{n} = \mathbf{n}' - \mathbf{n} = \pm 1$  e  $\Delta \mathbf{n} = \pm 3, \pm 1$ . Já o termo quadrático está localizado na diagonal principal e estabelece um acoplamento entre estados, tais que  $\Delta \mathbf{n} = \pm 2$ .

Essas regras de conectividade ou acoplamento possibilitaram a divisão do espaço de Hilbert dos spinores  $\Psi^{\pm}(\mathbf{r})$  em dois subespaços independentes, classificados de acordo com a paridade do número quântico principal ( $\mathbf{n}$ ) e da orientação do spin.

Feito esse cálculo analítico dos elementos de matriz, realizamos um estudo sobre o

comportamento do acoplamento spin-órbita e do confinamento lateral sobre os estados da banda de condução de um nanofio cilíndrico de semicondutores com simetria tipo blenda de zinco incluído na referência [34].

### 4.3 Resultados para os níveis de energia e a polarização de spin do estado fundamental de um nanofio.

Os resultados analíticos dos termos SO de Dresselhaus possibilitaram, de forma mais simples, resolver o problema de autovalor  $[\mathbf{H} - \mathbf{I}\mathcal{E}]\mathbf{C} = \mathbf{0}$ , onde  $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_D$  é a uma matriz quadrada e  $\mathbf{C}$  é um vetor formador do conjunto de autoestados. Com as regras de acoplamentos bem definidas pelas soluções analíticas dos elementos de matriz, foi possível separarmos os espaços de Hilbert em dois subespaços. Assim, a subdivisão do espaço de Hilbert permitiu que a convergência numérica fosse obtida mais rapidamente.

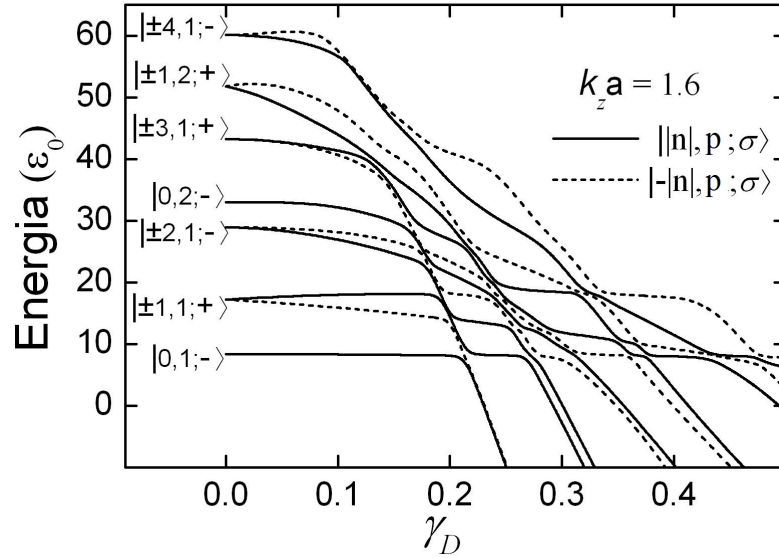


Fig. 4.2: As doze primeiras autoenergias de um nanofio cilíndrico, em unidades de  $\mathcal{E}_0$  versus o parâmetro  $\gamma_D$ , com  $k_z a = 1.6$

Assim, iniciamos o nosso estudo diagonalizando  $\mathbf{H}$  (Fig. 4.2), onde os autovalores, sem a presença do acoplamento SO, se encontram degenerados 2 a 2 para  $\mathbf{n} = \mathbf{0}$ , e degenerados 4 a 4 para  $\mathbf{n} \neq \mathbf{0}$ . A Fig. 4.2 apresenta os 12 primeiros autovalores em função do parâmetro  $\gamma_D$  e  $\mathcal{E}_0 = \hbar^2/2m^*a^2$ . Ao inserirmos gradativamente cada um dos termos do acoplamento SO vemos uma quebra da degenerescência dos termos  $\mathbf{n} \neq \mathbf{0}$  em

2 a 2 o que divide o espaço em  $\mathbf{n} > \mathbf{0}$  e  $\mathbf{n} < \mathbf{0}$ .

Em seguida analisamos quão significativa, para a estrutura eletrônica de elétrons, seria a inclusão de cada termo (linear, quadrático e cúbico) no Hamiltoniano (Fig. 4.3). Quando consideramos apenas os termos lineares não se detectou nenhuma modificação efetiva do espectro. Para os estados  $|\pm 1, 1; +\rangle$  e  $|+ 2, 1; +\rangle$  a contribuição significativa provém dos termos  $H_{2D}$  e  $H_{3D}$ . Um outro fato interessante refere-se a grande contribuição devida à inclusão do termo cúbico no estado  $| - 2, 1; +\rangle$ .

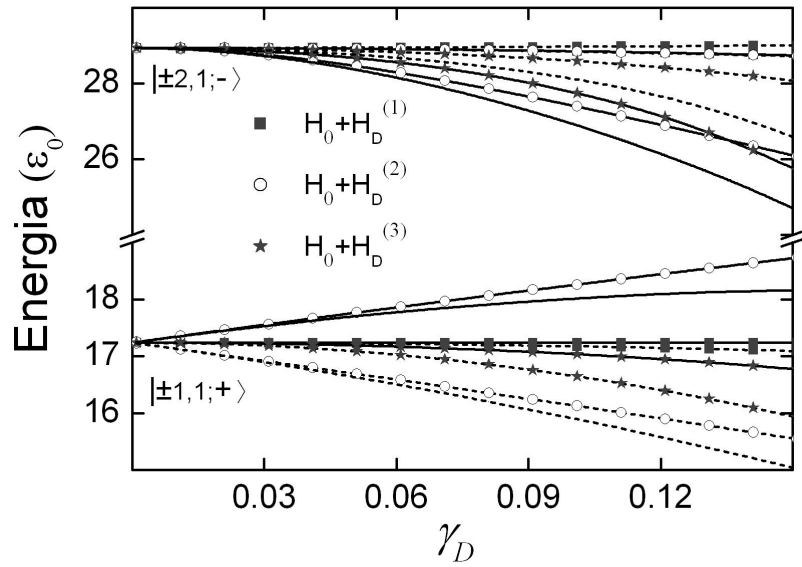


Fig. 4.3: Comparação entre as contribuições dos termos lineares (quadrados), quadráticos (círculos) e cúbicos (estrelas) da ISO definidos nos Hamiltonianos devido a Dresselhaus, em relação ao Hamiltoniano completo (linhas sem símbolos). Linhas contínuas referem-se á estados com  $\mathbf{n}$  positivo e linhas tracejadas á estados com  $\mathbf{n}$  negativo.

Um próximo passo a ser analisado, é o caráter da polarização de spin destes estados na banda de condução. Definindo a polarização de spin como  $\sigma_z(\mathbf{n}, \mathbf{p})$ , temos

$$\sigma_z(\mathbf{n}, \mathbf{p}) = \frac{\langle \Psi_{\mathbf{n}, \mathbf{p}} | \hat{S}_z | \Psi_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'} \rangle}{\langle \Psi_{\mathbf{n}, \mathbf{p}} | \Psi_{\mathbf{n}', \mathbf{p}'} \rangle}. \quad (4.23)$$

A Fig. 4.4 apresenta as curvas de nível de  $\sigma_z(\mathbf{n}, \mathbf{p})$  no estado fundamental  $(\mathbf{0}, \mathbf{1})$  para  $2m\beta/\hbar^2 = 5\text{\AA}$  em função do raio do nanofio de  $InP$  e do número de onda  $k_z$ . Notamos que para raios maiores que  $40\text{\AA}$  há um grande intervalo de valores de  $|k_z|$ , mostrando uma máxima polarização, ou seja,  $\sigma_z(\mathbf{0}, \mathbf{1}) \cong 1$ . À medida que aumentamos o raio observamos a diminuição dessa polarização de spin.

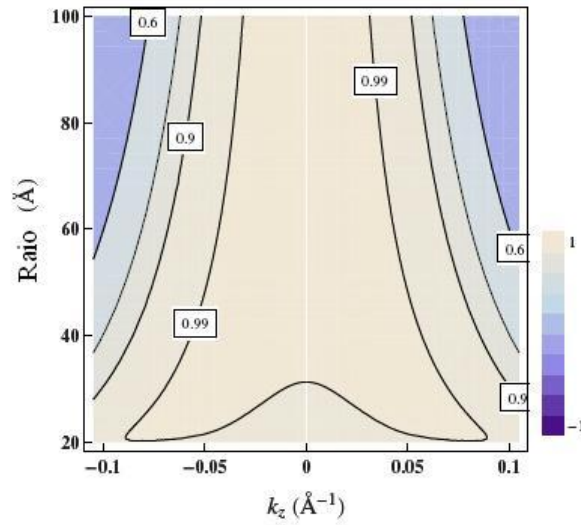


Fig. 4.4: Contorno de  $\sigma_z(\mathbf{n}, \mathbf{p})$  do estado fundamental (0,1) versus o raio do nanofio cilíndrico versus o número de onda  $k_z$ .

Devemos ressaltar que a presença dessa polarização de spin se deve apenas aos aspectos de confinamento sem a inclusão de campos externos (magnéticos ou elétricos). O confinamento cilíndrico permite a quantização do momento angular que, na presença da interação SO, provoca o desdobramento dos estados de spin. Num sistema quase-unidimensional, como o nanofio, estes efeitos estão modulados pelo valor do momento do portador ao longo do eixo, logo seria possível pensar numa sintonia destas propriedades a partir de fenômenos de transporte o que será objeto de estudo em trabalhos futuros.

## 5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho pretendeu-se caracterizar, de forma abrangente, algumas propriedades de nanofios semicondutores e estudar os fundamentos teóricos, tanto clássicos como quânticos, para sustentar estas análises. Inicialmente, de forma clássica, verificamos como aplicar o formalismo da eletrodinâmica ao estudo do espalhamento da luz e contrastar este modelo com os fenômenos de PL em nanofios observados experimentalmente. Tais modelos aparecem reportados na literatura sem uma discussão precedente e, como demonstrado aqui, seus marcos de aplicação não são compatíveis com a fenomenologia experimental analisada.

Este estudo possibilitou introduzirmos elementos quânticos para elucidarmos uma fenomenologia coerente com os resultados obtidos pelos nossos colaboradores experimentais. Complementando a abordagem de propriedades óticas, finalizamos esta dissertação analisando os efeitos da ISO na banda de condução, uma vez que os resultados analíticos, satisfatoriamente obtidos para o estudo da banda de valência, poderiam ser utilizados nesse novo cálculo.

Na abordagem clássica, motivados por resultados anteriores [1, 11, 7], iniciamos o estudo calculando a solução geral do potencial elétrico, em coordenadas cilíndricas para aplicar as condições de contorno e calcular o potencial e o campo elétrico dentro e fora do cilindro na presença de um campo externo perpendicular à direção longitudinal do fio. Esses cálculos forneceram o seguinte resultado: a ordem de magnitude do campo elétrico interno induzido no cilindro por um campo elétrico externo na direção paralela são proporcionais e, em contrapartida, na direção perpendicular há uma diminuição do campo elétrico induzido, no fator  $\delta$ . Além disso concluímos que, quando o  $\mathbf{E}^e$  incide paralelamente à direção longitudinal do cilindro, somente observamos polarização elétrica nessa mesma direção ( $\mathbf{P}(\parallel)$ ). Para a incidência perpendicular ao fio, observamos uma

polarização também perpendicular ao fio ( $\mathbf{P}(\perp)$ ). Em toda esta abordagem consideramos o tensor de polarizabilidade como diagonal.

Com todas estas informações, analisamos as intensidades da luz espalhada por um cilindro pequeno comparado com o comprimento de onda, para três tipos diferentes de polarização elétrica no processo de excitação ótica: paralela, perpendicular e depolarizada. Os resultados obtidos da Fig. 2.2(A) foram confirmados pelos cálculos quando há uma condição de excitação depolarizada, também verificamos que a ordem de grandeza entre as intensidades provenientes das luzes incidentes polarizada paralelamente e perpendicularmente ao eixo do fio e verificamos teoricamente (Figs. 2.7, 2.8 e 2.9), o quão mais intensa a detecção na direção paralela é em relação à perpendicular.

Um dos equívocos cometidos na referência [1] é usar esta mesma abordagem clássica para discutir a emissão de luz polarizada em uma direção bem definida quando sua excitação também é bem definida, ou seja, o resultado apresentado na Fig. 2.2(B), mostra uma condição de excitação fixa paralela à direção axial do fio e apresenta uma curva referente à detecção de luz com polarização perpendicular quando o esperado seria uma emissão totalmente polarizada paralelamente ao fio. Como já discutido, outra incoerência refere-se à caracterização do fenômeno de PL a partir de um modelo clássico, no qual impõe que a frequência da luz incidente seja igual à frequência de luz emitida (espalhamento elástico). Essas observações motivaram a análise da importância dos efeitos de quantização devido ao confinamento, assim como os complexos efeitos de relaxação de portadores entre os estados excitados e os estados fundamentais das bandas de condução e valência que participam da recombinação ótica. Estes estados apresentam simetrias que determinam regras de seleção para transições óticas.

Motivados por estas contradições e pelos resultados obtidos pelos nossos colaboradores experimentais (Fig. 3.1), demos início ao estudo da estrutura eletrônica desses nanofios e seus efeitos de quantização. A estrutura da banda de valência foi calculada a partir da diagonalização do Hamiltoniano de Luttinger [14]. O cálculo dos seus elementos de matriz foram totalmente obtidos de forma analítica, o que forneceu regras de seleção bem determinadas e a partir dessas fomos capazes de subdividir o espaço de Hilbert em sub-

espaços ortogonais. Todas essas simplificações matemáticas facilitaram a diagonalização numérica e a discussão qualitativa dos resultados.

Como observado experimentalmente, introduzimos efeitos de tensão em nosso Hamiltoniano. Assim, conseguimos obter resultados satisfatórios, que possibilitaram a elucidação da natureza das bandas de recombinação ótica, responsáveis pelas ressonâncias nos picos B e C da Fig. 3.1. [35]

Além do cálculo de dispersão de energia do sistema, foi possível caracterizar os níveis de energia quanto ao caráter das transições envolvendo buracos LH(0,1) e HH(0,1). Esses dados quantificaram o grau de hibridização dos níveis. Outro importante resultado refere-se às posições dos picos B e C na Fig. 3.1 coincidir com a separação dos níveis de energia LH e HH, ambos igual a 44.4 meV. Com esses resultados satisfatórios podemos avançar nossos estudos no cálculo das intensidades relativas de emissão para as diferentes transições e sua correlação com os parâmetros estruturais dos nanofios: composição, tamanho e tensões.

Apesar de termos considerado a banda de condução como parabólica, fomos capazes de introduzir efeitos da interação SO usando as analogias matemáticas existentes entre os elementos de matriz do Hamiltoniano de Luttinger e o Hamiltoniano de Dresselhaus, referente à banda de condução. Para que esse efeito também fosse descrito de forma analítica bastou apenas o cálculo dos elementos de matriz que possuíam os termos de terceira ordem, uma vez que os de primeira e segunda foram obtidos a partir dos elementos de matriz do Hamiltoniano da banda de valência. Satisfatoriamente conseguimos respostas analíticas para esse cálculo o que nos forneceu novas regras de seleção.

A partir da diagonalização do Hamiltoniano de Dresselhaus obtivemos as leis de dispersão, onde, sem a presença da ISO, os níveis de energia encontram-se degenerados 2 a 2 para  $\mathbf{n} = \mathbf{0}$  e 4 a 4 para  $\mathbf{n} \neq \mathbf{0}$ . Com a ISO presente, observamos a quebra da degenerescência para  $\mathbf{n} \neq \mathbf{0}$  em 2 a 2. Incluindo gradativamente os termos  $\mathbf{H}_{1D}$ ,  $\mathbf{H}_{2D}$  e  $\mathbf{H}_{3D}$ , analisamos o grau de influência de cada um deles no espectro. Assim, conferimos que o termo linear pouco afeta as energias dos níveis, enquanto os termos quadráticos e cúbicos são responsáveis pelo acoplamento entre eles.

---

A polarização de spin dos estados foi outra análise realizada, o qual forneceu um resultado inesperado. O cálculo da polarização foi possível considerando apenas aspectos de simetria, ou seja, não foi necessário considerar a presença de campos externos para que ela ocorresse.

Esta proposta, de caracterizarmos os nanofios semicondutores, terá continuidade, uma vez que não realizamos a interligação direta entre o estudo referente à resposta ótica e a introdução da ISO. A sequência de tarefas para dar continuidade a esta linha de pesquisa está relacionada à caracterização eletrônica de nanofios quânticos semicondutores de diferentes geometrias e composições, assim como de suas propriedades óticas e de transporte.

Conjuntamente com colaborações experimentais, tanto na caracterização ótica como na síntese e crescimento dessas estruturas, pretendemos desenvolver metodologias para a caracterização de propriedades óticas com foco no estudo da eficiência ótica destes sistemas e sua sintonia com propriedades estruturais: geometria, composição e tamanhos. A adaptação e melhoramento de métodos de cálculo de estrutura eletrônica, utilizando métodos  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ , resultam objetivos fundamentais na continuidade desse trabalho.



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] J. Wang, M. S. Gudiksen, X. Duan, Y. Cui and C. M. Lieber, *Science*. **293**, 1455 (2001).
- [2] X. F. Duam and C. M. Lieber, *Adv. Mater.* **12**, 298 (2000).
- [3] M. T. Björk, B. J. Ohlsson, T. Sass, A. I. Persson, C. Thelander, M. H. Magnusson, K. Deppert, L. R. Wallenberg and L. Samuelson, *Nano Letters* **2**, 870 (2002).
- [4] T. Someya, H. Akiyama, H. Sakaki, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3664 (1995).
- [5] F. Vouilloz, D. Y. Oberli, M.-A. Dupertuis, A. Gustafsson, F. Reinhardt, and E. Kapon, *Phys. Rev. B* **57**, 12378 (1998).
- [6] H. Akiyama, T. Someya, H. Sakaki, *Phys. Rev. B* **53**, R4229 (1996).
- [7] P. Ils, A. Forchel, V. D. Kulakovskii, N. A. Gippius and S. G. Tikhodeev, *Phys. Rev. B* **51**, 4272 (1995).
- [8] J. Hasen, L. N. Pfeiffer, A. Pinczuk, S. He, K. W. West and B. S. Dennis, *Nature* **390**, 54 (1997).
- [9] M. S. Gudiksen, C. M. Lieber, *J. Am. Chem. Soc.* **122**, 8801 (2000).
- [10] M. S. Gudiksen, J. Wang, C. M. Lieber, *J. Phys. Chem. B* **105**, 4062 (2001).
- [11] E. A. Mulijarov, E. A. Zhukov, V. S. Dneprovskii and Y. Masumoto, *Phys. Rev. B*. **62**, 7420 (2000).
- [12] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media: Volume VIII*, 2nd ed, (Pergamon, Oxford, U.K.,2004).

- 
- [13] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields*, p 189, (Pergamon, Oxford, U.K.1984).
- [14] J.M. Luttinger, *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956).
- [15] Landolt-Börnstein Comprehensive Index, ed. O. Madelung and W. Martienssen (Springer, Berlin, 1996).
- [16] D. D. Nolte, W. Walukiewicz, and E. E. Haller *Phys. Rev. Lett.* **59**, 501 (1987).
- [17] K. H. Hong, J. Kim, S. H. Lee, J. K. Shin, *Nano Lett.* **8**, 1335 (2008).
- [18] U. Bockelmann, G. Bastard, *Phys. Rev. B.* **45**, 1688 (1992).
- [19] R. H. Parmenter, *Phys. Rev.* **100**, 573 (1955).
- [20] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- [21] G. E. Marques, A. C. R. Bittencourt, C. F. Destefani, and S. E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **72**, 045313 (2005).
- [22] S. Gopalan, J. K. Furdyna, and S. Rodriguez, *Phys. Rev. B* **32**, 903 (1985).
- [23] F. G. Pikus and G. E. Pikus, *Phys. Rev. B* **51**, 16928 (1995).
- [24] J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 146801 (2003).
- [25] S. Bandyopadhyay, S. Pramanika, and M. Cahay, *Superlattices Microstruct.* **35**, 67 (2004);
- [26] S. Kettemann, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 176808 (2007).
- [27] G. Fasol and H. Sakaki, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3643 (1993).
- [28] F. M. Alves, G. E. Marques, V. Lopez-Richard, and C. Trallero- Giner, *Semicond. Sci. Technol.* **22**, 301 (2007).
- [29] F. M. Alves, C. Trallero-Giner, V. Lopez-Richard, and G. E. Marques, *Phys. Rev. B* **77**, 035434 (2008).

- 
- [30] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer Tracts in Modern Physics (Springer, Berlin, 2003), Vol. 191.
- [31] C. F. Destefani, S. E. Ulloa, and G. E. Marques, *Phys. Rev. B* **69**, 125302 (2004).
- [32] F. Malet, M. Pi, M. Barranco, L. Serra, and E. Lipparini, *Phys. Rev. B* **76**, 115306 (2007).
- [33] S. Pramanik, S. Bandyopadhyay, and M. Cahay, *Phys. Rev. B* **68**, 075313 (2003).
- [34] L. Villegas-Lelovsky, C. Trallero-Giner, M. Rebello Sousa Dias, V. Lopez-Richard and G. E. Marques, *Phys. Rev. B* **79**, 15530 (2009).
- [35] V. Lopez-Richard, J. C. González, F. M. Matinaga, C. Trallero-Giner, E. Ribeiro, M. Rebello Sousa Dias, L. Villegas-Lelovsky, and G. E. Marques, *Nano Letters* **9**, 3129 (2009).
- [36] K. D. Machado, *Teoria do Eletromagnetismo: Volume I*, 2nd ed, (UEPG, Ponta Grossa, 1984).
- [37] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2nd ed, (John Wiley & Sons, 1975).
- [38] J. M. Luttinger e W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
- [39] V. Lopez-Richard, *Efecto magneto-polarónico en los semiconductores* Facultad de Física, Universidad de Havana, 1996. Dissertação.
- [40] J. C. González, M. I. N. da Silva, X. S. Lozano, D. Zanchet, D. Ugarte, E. Ribeiro, H. R. Gutierrez, M. A. Cotta, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. **6**, 2182 (2006).
- [41] F. H. Pollak, M. Cardona, *Phys. Rev.* **172**, 816 (1968).
- [42] E. F. Shoubert, *Quantum Mechanics Applied to Semiconductor Device*.
- [43] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, (Les éditions de physique, 1990).

- 
- [44] S. Datta, *Modular Series on Solid States Devices (Quantum Phenomena): Volume VIII*,(Addison-Wesley Publishing Company, 1989).
- [45] Per-Olov Löwdin, *J. Chem. Phys.* **19**, 1396 (1951).
- [46] V. Lopez-Richard, *Magneto-Optical Properties of Zinc-Blende Type Semiconductors and Semiconductor-Nanostructures*. Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos, 2001. Tese.
- [47] D. Bimberg, K. Hess, N. O. Lipari, J. U. Fischbach, M. Altarelli, *Physica* **89B**, 139 (1977) .
- [48] J. J. Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, 1967).
- [49] A. S. Davydov, *Quantum Mechanics*, 2rd ed. (Instituto del Libro, Cuba, 1988).
- [50] R. Eisberg e R. Resnick, *Física Quântica*, 1rd ed. (Campus, 1979).