

# Estrutura Eletrônica de Anéis Quânticos

VIVALDO LOPES OLIVEIRA NETO

UFSCar - São Carlos/SP

Outubro/2011

Universidade Federal de São Carlos  
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia  
Departamento de Física

# Estrutura Eletrônica de Anéis Quânticos

VIVALDO LOPES OLIVEIRA NETO  
PROF. DR. VICTOR LOPEZ RICHARD

Dissertação apresentada ao Departamento de  
Física da Universidade Federal de São Carlos  
- DF/UFSCar como parte dos requisitos para  
obtenção do título de Mestre em Física.

UFSCar - São Carlos/SP

Outubro/2011

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

L864ee

Lopes-Oliveira Neto, Vivaldo.

Estrutura eletrônica de anéis quânticos / Vivaldo Lopes  
Oliveira Neto. -- São Carlos : UFSCar, 2011.  
54 f.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São  
Carlos, 2011.

1. Física do estado sólido. 2. Matéria condensada. 3.  
Método k.p. 4. Estrutura eletrônica. 5. Anéis quânticos. I.  
Título.

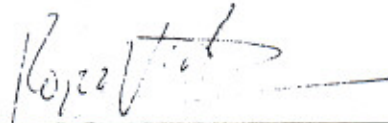
CDD: 530.41 (20<sup>a</sup>)

**VIVALDO LÓPES OLIVEIRA NETO**

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: 09 de agosto de 2011**

**BANCA EXAMINADORA**



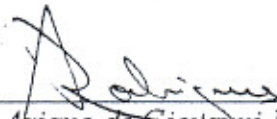
---

*Prof. Dr. Víctor López Richard (Orientador)*  
*Universidade Federal de São Carlos - DF*



---

*Prof. Dr. Euclides Marega Junior*  
*Universidade de São Paulo - IFSC*



---

*Prof. Dr. Ariano de Giovanni Rodrigues*  
*Universidade Federal de São Carlos - DF*

*Dedico este trabalho aos meus pais Célio e Edna, meus avós, meus irmãos e minha namorada Sarah.*

# Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Victor Lopez Richard pela orientação, confiança, ensinamentos e amizade durante todo o período de realização desse trabalho, permitindo sua conclusão com sucesso.

Aos professores César Constantino, Salomon Mizrahi, Adilson de Oliveira, Paulo Farinas, Leonardo Castelano e Márcio Peron pelos ensinamentos durante as disciplinas cursadas.

Ao Prof. Dr. Gilmar Eugenio Marques e à Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Yara Gobato Galvão por toda ajuda e amizade durante o período de desenvolvimento do trabalho.

Ao Prof. Dr. Euclides Marega Jr. pela colaboração no trabalho.

Ao amigo Daniel César, pela ajuda nas principais etapas do trabalho, proporcionando uma maior segurança nos resultados obtidos.

À minha mãe Edna, pelo carinho, pela imensa dedicação materna, pela educação que me foi dada, pelo apoio nas minhas decisões ensinando-me a sempre ver os lados bons e ruins de cada coisa e pela frequente presença em minha vida.

À minha namorada Sarah, pela confiança depositada em mim, me acompanhando, quando decidi vir de tão longe para fazer pós-graduação na UFSCar - São Carlos, e por estar sempre ao meu lado, ajudando-me nos momentos difíceis e comemorando minhas conquistas.

Ao meu irmão Célio (Nano) pela convivência desde a graduação, e pelos excelentes jogos de tênis aos fins de semana.

Ao meu pai, Célio, meus irmãos Roberta e João Pedro, meus avós, Auda, Vivaldo, Erica e Elias que sempre me incentivaram, direta ou indiretamente.

Aos meus amigos de sala: Jaldair, Leonardo, e Leonilson que sempre estiveram ao meu lado me apoiando e me aturando em todas as horas difíceis.

Aos meus amigos e companheiros de futebol: Anibal, Armandinho, Bruno (Piruca), Carlinhos, João, Jorge Ronan, Ivan, Lucelene, Marcelo, Márcio Daldin, Mariama, Maycon, Nicolau, Ofélia, Paula, Pedro Ramon, Rafael (Orelha), Raphael Fortes, Ricardo (Bilico), Washington, etc, que estiveram ao meu lado nos últimos dois anos.

Aos meus amigos da Bahia, que mesmo distantes, permaneceram presentes.

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

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

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

*"There's plenty of room at the bottom"*

(Richard Feynman)



## Resumo

As estruturas nanoscópicas de topologia anelar, ou anéis quânticos, têm atraído o interesse devido a sua simetria rotacional única e à possibilidade de verificar fenômenos quânticos fundamentais. Dentre eles, o estudo de efeitos relacionados à interferência do tipo Aharonov-Bohm aparece com especial ênfase. Cálculos analíticos da estrutura eletrônica dos anéis quânticos foram realizados para os casos de um elétron confinado em um potencial unidimensional e tridimensional. Estes cálculos foram complementados com a simulação da estrutura eletrônica da banda de valência utilizando o método k.p, que é o objetivo principal do trabalho. Esta contribuição teórica forma parte de uma colaboração com grupos experimentais de crescimento e de espectroscopia onde são tratados problemas relacionados à manipulação de estados eletrônicos e de spin em sistemas quase-zero dimensionais de topologia anelar. O estado fundamental do elétron e do buraco em pontos quânticos (sistemas quase-zero-dimensionais) possui tipicamente momento angular zero (na ausência de campos magnéticos e para campos suficientemente baixos) e exibe uma resposta diamagnética dos estados desdobrados de spin uma vez que um campo magnético externo é aplicado. Nos pontos quânticos não magnéticos as propriedades de spin são fundamentalmente atribuídas aos elétrons e ao buraco pesado. Em contrapartida, se assume que os buracos leves possuem um papel menor nas propriedades do estado fundamental do éxciton. Nossos resultados mostram que o acoplamento entre bandas pode gerar estados com hibridização do momento angular, inclusive o estado fundamental e o papel do buraco leve acaba sendo relevante. A adaptação e melhoramento do cálculo da estrutura eletrônica utilizando métodos k.p foram dois dos objetivos fundamentais deste trabalho. As ferramentas teóricas desenvolvidas visam contribuir para o estabelecimento de protocolos para o uso e aplicação otimizada de tais sistemas.

**Palavras-Chave:** Anéis Quânticos. Método K.P. Estrutura Eletrônica.

## Abstract

The nanoscopic structures with ring topology, or quantum rings, have attracted the interest due to their unique rotational symmetry and the possibility of checking fundamental quantum phenomena. Among them, the study of Aharonov-Bohm interference effects appears with special emphasis. Analytical calculations of the electronic structure of quantum rings were performed for the electron confined in one-dimensional and three-dimensional potentials. These calculations were complemented by the electronic structure simulation of the valence band using the k.p method, main objective this work. This theoretical contribution is a part of a collaboration with experimental groups of growth and spectroscopy which deal with problems related to the manipulation of electronic states and spin properties of quantum rings. The ground states of both electrons and holes in quantum dots (quasi-zero-dimensional systems) have zero angular momentum (in the absence of magnetic fields and low fields) and exhibit a diamagnetic response of the spin states in the presence of an external magnetic field. In non-magnetic quantum dots, the spin properties are mainly attributed to the electron spin and the heavy hole. On the other hand, it is assumed that the light holes have a minor role in the properties of the exciton ground state. Our results show that the interband coupling may lead to the angular momentum hybridization of the electronic states, even in the ground state and the light hole may assume a relevant role. The adaptation and improvement of calculations of the electronic structure using the k.p methods were two of the main objectives of this work. The theoretical tools developed aim to contribute to the establishment of protocols for optimal use and application of such systems.

**Keywords:** Quantum Rings. K.P Method. Electronic Structure.

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>CONCEITOS BÁSICOS E MODELOS TEÓRICOS</b>	<b>6</b>
2.1	Propriedades Cristalinas . . . . .	6
2.1.1	Arsênio ( <i>As</i> ), Gálio ( <i>Ga</i> ) e Índio ( <i>In</i> ) . . . . .	7
2.1.2	Arseneto de Gálio ( <i>GaAs</i> ) . . . . .	7
2.1.3	Arseneto de Índio ( <i>InAs</i> ) . . . . .	9
2.1.4	Arseneto de Gálio-índio ( <i>InGaAs</i> ) . . . . .	9
2.2	Estrutura Eletrônica . . . . .	10
2.2.1	A Aproximação de Massa Efetiva e o Método <b>k.p</b> . . . . .	11
2.2.2	Hamiltoniano de Luttinger . . . . .	15
2.2.3	Efeitos de <i>Strain</i> . . . . .	19
<b>3</b>	<b>BANDA DE CONDUÇÃO</b>	<b>25</b>
3.1	Modelo 1D . . . . .	25
3.1.1	O Elétron em um Anel Quântico Unidimensional . . . . .	26
3.1.2	Resultados do Anel Unidimensional . . . . .	27
3.2	Modelo 3D . . . . .	28
3.2.1	O Elétron em um Anel Quântico Tridimensional . . . . .	31
3.2.2	Resultados do Anel Tridimensional . . . . .	33
<b>4</b>	<b>BANDA DE VALÊNCIA</b>	<b>36</b>
4.1	O Hamiltoniano em Coordenadas Cilíndricas e o Cálculo dos Elementos de Matriz . . . . .	36
4.2	Resultados . . . . .	39

<b>5 CONCLUSÕES</b>	<b>48</b>
5.1 Trabalhos Apresentados em Congressos no Período da Dissertação . . . . .	50

# Lista de Figuras

2.1	(a) Arranjo espacial dos átomos em uma estrutura blenda de Zinco; (b) Primeira zona de Brillouin de uma rede cúbica de face centrada (octaedro truncado). São mostrados também alguns pontos e linhas de alta simetria.	8
2.2	(a) Estrutura de banda do <i>GaAs</i> calculada pelo método pseudopotencial [27]; (b) Estrutura de banda em torno do ponto $\Gamma$ para um semicondutor de <i>gap</i> direto mostrando as bandas de condução, buraco leve, buraco pesado e <i>split – off</i> .	9
2.3	Variação da energia do <i>gap</i> em função da componente paralela do <i>strain</i> .	22
2.4	Imagens de anéis quânticos de <i>InGaAs</i> auto-organizados caracterizados por microscopia de força atômica (AFM). [51]	23
2.5	Projeções no plano do parâmetro de rede para anéis quânticos (a). (b) Mostra a representação da concentração de Índio para cada região do parâmetro de rede dos anéis. A projeção da deformação elástica no plano, obtida através da consideração do desvio do parâmetro de rede medido pela relaxação na concentração da liga, é mostrada no painel (c).	23
3.1	Representação de um anel usado nos cálculos do Modelo 1D.	26
3.2	Estados de energia do anel unidimensional para dois valores do raio em função do fluxo magnético.	27
3.3	Potencial de confinamento lateral $V(x,y)$ que simula o confinamento anelar.	30
3.4	Estados de energia do anel tridimensional em função do campo magnético para $R=11.6$ nm e duas larguras diferentes.	34
3.5	Estados de energia do anel tridimensional em função do campo magnético para $R=22.5$ nm e duas larguras diferentes.	35

3.6	(a), (b), (c) e (d) Orbitais representando as superfícies de igual probabilidade de encontrar o elétron no anel para diferentes valores de $n$ e $l$ segundo $ \Psi_{n,m,l}(r, \varphi, z) ^2 = cte$ , painéis superiores. Painéis inferiores, representação da função $ \Psi(r, 0, 0) ^2$ , e as intercepções $ \Psi(r, 0, 0) ^2 = cte$ , com excessão do (d), onde foi usado $z = 0.01$ , pois em $z = 0$ a função é nula. . . . .	35
4.1	Medidas de dispersão de energia por raios-X ao longo do plano de um único anel utilizando um microscópico de transmissão [13]. . . . .	40
4.2	Os símbolos representam os valores de $E_g$ em função da posição em um corte transversal do QR obtido pelo uso da Fig. 4.1 e a curva sólida um corte do potencial teórico. O <i>inset</i> mostra o perfil 3D do potencial teórico usado para modelar o confinamento do QR com os valores $E_g$ . . . . .	41
4.3	Níveis de energia da banda de valência em função da largura efetiva do anel para um raio $R = 14.0$ nm e altura $L = 5$ nm, calculados sem <i>strain</i> no plano, $\varepsilon_{\parallel} = 0$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados. . .	42
4.4	Níveis de energia da banda de valência em função da largura efetiva do anel para um raio $R = 14.0$ nm e altura $L = 5$ nm, calculado com <i>strain</i> no plano $\varepsilon_{\parallel} = 1.37\%$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados.	42
4.5	Coefficientes da expansão da função de onda do estado fundamental da banda de valência em função da largura efetiva para um raio $R = 14.0$ nm calculado com e sem <i>strain</i> . . . . .	43
4.6	Níveis de energia da banda de valência em função do raio efetivo do anel para uma largura $\Delta r = 2.29$ nm, calculada sem <i>strain</i> no plano, $\varepsilon_{\parallel} = 0$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados. . . . .	43
4.7	Níveis de energia da banda de valência em função do raio efetivo do anel para uma largura $\Delta r = 2.29$ nm, calculada com um <i>strain</i> no plano $\varepsilon_{\parallel} = 1.37\%$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados. . . . .	44
4.8	Coefficientes da expansão da função de onda do estado fundamental da banda de valência em função do raio efetivo para uma largura $\Delta r = 2.29$ nm calculado com e sem <i>strain</i> . . . . .	45

4.9	Níveis de energia da banda de valência em função do campo magnético aplicado no anel para uma largura $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$ e um raio de $R = 14.0 \text{ nm}$ , calculada sem <i>strain</i> no plano, $\varepsilon_{\parallel} = 0$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados. . . . .	45
4.10	Níveis de energia da banda de valência em função do campo magnético aplicado no anel para uma largura $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$ e um raio de $R = 14.0 \text{ nm}$ , calculada com um <i>strain</i> no plano $\varepsilon_{\parallel} = 0.0137$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados. . . . .	46
4.11	Coefficientes da expansão da função de onda do estado fundamental da banda de valência em função do campo magnético aplicado em um anel de raio $R = 14.0 \text{ nm}$ e largura efetiva $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$ , calculado com e sem <i>strain</i> . . . . .	46

# Lista de Tabelas

2.1	<i>Gap</i> da banda de valência, massa efetiva do elétron, e suas relações numéricas para alguns semicondutores de <i>gap</i> direto, valores extraídos da referência [35] . . . . .	14
2.2	Parâmetros de Luttinger para o <i>InAs</i> e <i>GaAs</i> , extraídos da referência [44]	18
2.3	Parâmetros do <i>InAs</i> , extraídos da referência [50] . . . . .	22



# Capítulo 1

## INTRODUÇÃO

Este projeto de mestrado visa, além da obtenção de resultados originais em uma área de interesse atual, a familiarização com as ferramentas teóricas básicas para o desenvolvimento de estudos em diversas áreas relacionadas com a matéria condensada e seu vínculo com a simulação e previsão de resultados experimentais de colaborações em andamento.

As estruturas nanoscópicas de topologia anelar, ou anéis quânticos (QR - do inglês *Quantum Ring*), têm atraído o interesse da comunidade científica devido a sua simetria rotacional única e à possibilidade de verificar fenômenos quânticos fundamentais [1, 2, 3]. Dentre eles, o estudo de efeitos relacionados à interferência do tipo *Aharonov-Bohm* aparece com especial ênfase [4, 5, 6].

Atualmente encontra-se uma série de trabalhos teóricos sobre as propriedades dos QRs [7, 8] acompanhados por investigações experimentais inovadoras de suas propriedades, tanto magnéticas quanto de transporte [9]. Alguns destes estudos foram realizados em escalas mesoscópicas, onde o espalhamento ainda influencia a fase de transporte coerente, e um grande número de estados quânticos é preenchido. Efeitos no limite quântico para poucos elétrons [10, 11], e estudos sobre sistemas anelares de muitos corpos [12] complementam o espectro de interesses nos anéis nanoscópicos.

A motivação para nosso trabalho parte da caracterização experimental de QRs por nossos colaboradores experimentais e a demanda pela análise sistemática da estrutura eletrônica destes sistemas. Estes anéis são formados a partir de pontos quânticos (QD - do inglês *Quantum Dot*) que colapsam como descrito a continuação.

A formação de ilhas de *InAs-GaAs* acontece como consequência da relaxação das tensões superficiais (*strain*) entre as ligas de *GaAs* e *InAs*. Tais estruturas podem assumir

diversas geometrias, dentre elas semi-esféricas ou lentiformes, cujas propriedades eletrônicas são análogas às de átomos, o que leva a chamá-los de átomos artificiais ou pontos quânticos [13]. Uma das técnicas usadas para crescer amostras de QDs e QRs é a epitaxia por feixe molecular (MBE - do inglês *Molecular Beam Epitaxy*), que consiste na deposição controlada de camadas de determinados elementos químicos sobre uma base cristalina (substrato) em condições de ultra-alto-vácuo. Essa técnica é de grande versatilidade no crescimento de camadas de semicondutores elementares como *Si* e *Ge*, binários como *GaAs*, *AlAs*, *GaN*, *InP*, *GaSb*, *InAs*, ligas ternárias tais como *AlGaAs*, *InGaAs*, *GaAsSb*, ligas quaternárias como *InGaAsP*, *AlGaAsSb*, etc., assim como no crescimento de heteroestruturas semicondutoras.

O modo de crescimento epitaxial mais utilizado na atualidade para pontos quânticos é o nucleado seguido de monocamada, conhecido como método de *Stranski-Krastanov*, iniciado com o crescimento de uma camada bidimensional, chamada de camada de molhamento, (do inglês *wetting layer*) e, após a deposição de algumas monocamadas, uma espessura crítica é atingida iniciando-se a formação de ilhas [14, 15]. Para que as amostras de QDs possam ser estudadas óptica ou eletricamente, é crescida uma camada chamada tampão com algumas dezenas de nanômetros que serve de proteção das nanoestruturas dos efeitos de oxidação e de incorporação de impurezas existentes fora da câmara de crescimento que podem contaminá-las.

Em 1997, García e colaboradores cresceram pontos quânticos de *InAs* cobertos por uma camada tampão de *GaAs* com espessura inferior a altura máxima dos pontos [16]. Como resultado, para valores específicos da altura dessa camada, houve uma mudança abrupta no perfil dos pontos quânticos; o material contido no centro destas nanoestruturas foi ejetado para as bordas, dando origem a uma estrutura com formato anelar. O crescimento dessas estruturas, chamadas de anéis quânticos, abriu um novo campo na Física de Semicondutores tanto para explorar fenômenos fundamentais da mecânica quântica como para estudar suas potenciais aplicações em dispositivos. Assim, o método *Stransky-Krastanov* é um dos mais utilizados para crescer anéis quânticos. Neste processo, uma fina camada do mesmo material constituinte da barreira com altura menor que a altura total dos pontos quânticos é depositada sobre estes. Tensões entre as superfícies agem então causando a migração de material do topo dos pontos quânticos em direção à região da camada molhada, dando origem aos anéis. Para obter uma melhor qualidade

nas amostras de anéis quânticos alguns fatores, além da espessura da camada tampão, são importantes, tais como: tempo de tratamento térmico (*annealing*) - interrupção no crescimento durante alguns segundos ou após a deposição de uma fina camada de *GaAs* por um determinado intervalo de tempo [17], temperatura de *annealing*, temperatura do substrato - normalmente mantida em torno de 520 a 540 °C para pontos/anéis, e difusão dos elementos químicos - que interfere diretamente no formato da nanoestrutura, levando à formação de anéis mais alongados em uma das direções, ou anéis completamente circulares [17, 18].

A dinâmica de crescimento é monitorada em tempo real pela técnica de difração de elétrons de alta energia por reflexão (RHEED - do inglês *Reflection High Energy Electron Diffraction*). Esse sistema consiste em um canhão de elétrons com uma energia em torno de 20 keV e comprimento de onda de de Broglie de 0.7 Å direcionado para o substrato com um ângulo de aproximadamente 1°. Essa configuração é escolhida de forma que a penetração do feixe incidente seja muito baixa, permitindo, assim, medir a presença de poucas camadas de átomos na superfície do material. O feixe refletido pela superfície atinge uma tela de Fósforo, na qual uma câmera de vídeo é acoplada, que envia os sinais de RHEED para um *software* que transforma esses sinais em imagens. Isso permite controlar a taxa de crescimento através das oscilações na intensidade dos sinais de RHEED.

Embora poucos artigos tenham sido publicados recentemente sobre crescimento e formação de anéis quânticos [19, 20], bem como suas propriedades ópticas e elétricas, desta forma, os princípios que levam ao surgimento dessas estruturas já é uma questão conhecida.

Usando como motivação a síntese destes sistemas anelares e sua caracterização morfológica, elaboramos a presente dissertação com o objetivo fundamental de estudar a **estrutura eletrônica de anéis quânticos** para analisar os seguintes tópicos:

- (1) correlação entre a estrutura eletrônica e os parâmetros morfológicos dos anéis: raio, largura, e altura nos intervalos de parâmetros experimentais disponíveis;
- (2) modulação da estrutura eletrônica na banda de condução e de valência com um campo magnético aplicado ao longo do eixo do anel, simulando condições experimentais;
- (3) comparação entre os resultados de modelos unidimensionais e tridimensionais para anéis quânticos;
- (4) análise da influência dos efeitos de tensões na estrutura eletrônica da banda de

valência a partir da corroboração experimental da existência destes.

Tal análise permitirá elucidar a questão da importância dos efeitos de hibridização do caráter dos estados, fundamentalmente na banda de valência. Questões relevantes como o papel do momento angular na resposta magnética dos estados eletrônicos dos anéis quânticos serão discutidas. Para isso, foi necessário primeiramente o estudo de fundamentos da teoria quântica de sólidos, aprender métodos de cálculo de estrutura eletrônica, elaborar um método versátil de simulação da estrutura eletrônica da banda de condução em anéis tridimensionais (aproximação de banda parabólica) capaz de conter no mesmo marco teórico, um campo magnético axial. Estender a simulação ao problema da estrutura eletrônica na banda de valência e caracterizar a estrutura eletrônica de anéis em função do campo magnético modulada pelos parâmetros estruturais: raio, largura e altura, foi o segundo passo do trabalho.

O modelo unidimensional usado em cálculos da estrutura eletrônica da banda de condução de QRs reportados na literatura [21, 22, 23] é eficiente quando se analisam efeitos qualitativos na presença de campo magnético, além de considerar a influência do raio do anel (único parâmetro livre). Já o modelo tridimensional leva em conta os efeitos relacionados à largura e altura do sistema. Por sua vez, o cálculo da estrutura eletrônica da banda de valência mostra a mudança de caráter dos estados (incluindo o fundamental) com a hibridização das bandas de buraco leve (lh - do inglês *light hole*) e buraco pesado (hh - do inglês *heavy hole*) tanto para o caso de um anel não tensionado como sob efeitos de *strain*. Os cálculos realizados para a banda de valência, também mostram que a interação entre as bandas de buraco leve e pesado causa deformações nos níveis de energia onde aparecem anti-cruzamentos.

O cumprimento destes objetivos específicos implica o estudo de fundamentos da teoria quântica de semicondutores, em particular o método  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  [24, 25] e sua extensão ao modelo de função envelope. Os resultados e ferramentas de cálculo elaboradas neste trabalho são importantes para estudos posteriores já que permitem correlacionar as propriedades eletrônicas com a simulação da interação elétron-luz, cálculo de modos de excitações elementares, dentre outros. Vários modelos teóricos podem ser complementares no estudo destes efeitos, propiciando uma compreensão e um aprendizado mais abrangente dos métodos teóricos fundamentais usados no estudo das propriedades quânticas da matéria condensada: métodos perturbativos e métodos numéricos para a simulação de propriedades

eletrônicas, etc.

Este trabalho foi dividido em quatro capítulos. No primeiro capítulo, realizou-se um estudo sobre as características dos materiais semicondutores que compõem os QRs estudados *In*, *As* e *Ga*, e das ligas binárias *InAs* e *GaAs* e ternária *InGaAs*. Além de apresentar a aproximação de massa efetiva e o método **k.p**, modelo teórico utilizado nos cálculos das bandas de condução e valência. No segundo capítulo, é apresentado o cálculo analítico da estrutura eletrônica do caso de um elétron confinado em um anel de *InAs* (banda de condução). No terceiro, detalhou-se o método **k.p** para construir e calcular os elementos de matriz do Hamiltoniano de Luttinger 4 x 4. Esta matriz foi expandida para o cálculo numérico da estrutura eletrônica da banda de valência, ou seja, bandas de *lh* e *hh*. No quarto capítulo são apresentadas as conclusões do trabalho e as aplicações futuras.

Os resultados deste trabalho foram utilizados no artigo (submetido): "*In-plane mapping of buried InGaAs quantum ring and their electronic structure*" M. D. Teodoro, A. Malachias, **V. Lopes-Oliveira**, D. F. Cesar, G. E. Marques, V. Lopez-Richard, E. Marega Jr., Yu. I. Mazur, M. Benamara, and G. J. Salamo

A contribuição teórica deste projeto forma parte de uma colaboração com grupos experimentais de crescimento e de espectroscopia onde são tratados problemas relacionados à manipulação de estados eletrônicos e de *spin* em sistemas anelares.

# Capítulo 2

## CONCEITOS BÁSICOS E MODELOS TEÓRICOS

Para compreender as propriedades de nanoestruturas semicondutoras e os cálculos que serão apresentados neste trabalho, faz-se necessário discutir previamente algumas propriedades cristalinas, bem como a estrutura de bandas destas nanoestruturas. Para isso, dividimos este capítulo da seguinte forma: na seção 2.1 apresentaremos as propriedades cristalinas dos materiais semicondutores estudados e das ligas formadas por eles, na seção 2.2 descreveremos a estrutura eletrônica de anéis quânticos semicondutores. Esta última seção aborda os seguintes itens: o método  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  e a aproximação de massa efetiva, o Hamiltoniano de Luttinger usado para o cálculo de estrutura eletrônica da banda de valência, a discussão sobre o tensor de *strain*, sua relação com o *stress*, seus efeitos sobre as bandas de energia e como são introduzidos esses efeitos através de uma representação matricial.

### 2.1 Propriedades Cristalinas

Alguns materiais semicondutores, tais como Arsênio (*As*), Gálio (*Ga*) e Índio (*In*), e seus compostos binários, como Arseneto de Gálio (*GaAs*), Arseneto de Índio (*InAs*) ou ligas ternárias como Arseneto de Gálio-índio (*InGaAs*) possuem características interessantes responsáveis pelos fenômenos que envolvem estados eletrônicos próximos aos extremos das bandas de condução e valência que estão no foco deste trabalho. Tais características serão apresentadas a seguir.

### 2.1.1 Arsênio (*As*), Gálio (*Ga*) e Índio (*In*)

Descoberto em 1250 por Alberto Magno, o Arsênio de número atômico 33 e 42 nêutrons em sua forma mais estável, é encontrado principalmente na forma de *FeSAs* (Arsenopirita), *As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>* (Orpimenta), *CoSAs* (Cobaltina) e *As<sub>2</sub>O<sub>3</sub>* (Arsenolita), sendo raramente encontrado na forma livre na natureza. Pertence ao grupo V-A da tabela periódica e tem ponto de fusão de 814 °C. A configuração eletrônica do Arsênio no estado neutro é [Ar] 3d<sup>10</sup> 4s<sup>2</sup> 4p<sup>3</sup>, possuindo cinco elétrons na camada de valência, 4s<sup>2</sup> 4p<sup>3</sup> ([Ar] denota a configuração do Argônio).

Já o Gálio descoberto em 1875 por Lecoq de Boisbaudran, é um metal pertencente ao grupo III-A da tabela periódica, tem número atômico 31 com 39 nêutrons. À temperatura ambiente o Gálio é encontrado na forma líquida, tendo ponto de fusão de 28.76 °C e ponto de ebulição de 2174 °C. A configuração eletrônica do Gálio no estado neutro é [Ar] 3d<sup>10</sup> 4s<sup>2</sup> 4p<sup>1</sup>, possuindo três elétrons na camada de valência, 4s<sup>2</sup> 4p<sup>1</sup>.

O Índio foi descoberto por Ferdinand Reich e Theodor Richter em 1863, e isolado quatro anos mais tarde por Richter. Este elemento possui número atômico 49 com 66 nêutrons em sua forma mais estável. Pertence ao grupo III-A da tabela periódica, é um metal pouco abundante e se obtêm principalmente a partir de minas de Zinco. À temperatura ambiente é encontrado no estado sólido e tem ponto de fusão de 156.60 °C e ebulição de aproximadamente 2072°C. A configuração eletrônica no estado neutro é [Kr] 4d<sup>10</sup> 5s<sup>2</sup> 5p<sup>1</sup>, possuindo três elétrons na camada de valência, 5s<sup>2</sup> 5p<sup>1</sup> ([Kr] denota a configuração do Criptônio) [26]. Estes elementos se combinam formando sólidos cristalinos com propriedades semicondutoras.

### 2.1.2 Arseneto de Gálio (*GaAs*)

Na célula unitária do cristal de *GaAs*, existem oito elétrons de valência que contribuem para as ligações químicas (cinco do Arsênio e três do Gálio, segundo as configurações eletrônicas expostas acima). Esses oito elétrons ocupam estados híbridos para formar ligações tetraédricas entre um dos átomos (por exemplo o *Ga*) e seus quatro primeiros vizinhos (*As*). Podemos dizer que os orbitais destes átomos (tipo *s* ou tipo *p*) se hibridizam produzindo dois níveis, um ligante e outro antiligante. Como existe um grande número de células unitárias os níveis ligantes e antiligantes se alargam em bandas. Os níveis ligantes *s* são profundos e sempre ocupados por dois elétrons. Os seis elétrons restantes por célula

unitária preenchem completamente os três orbitais ligantes  $p$ . As bandas que se originam dos orbitais antiligantes são todas vazias, sendo a mais baixa delas (uma banda  $s$ ) a banda de condução do material.

No  $GaAs$ , os átomos de  $Ga$  e de  $As$  formam uma estrutura blenda de Zinco, como ilustrado na Fig. (2.1a). Esta consiste em duas redes cúbicas de face centrada (fcc - do inglês *face-centered cubic*) deslocadas uma da outra por um quarto de uma das diagonais principais do cubo. Como a rede de Bravais associada à rede blenda de Zinco é uma rede cúbica de face centrada, então sua rede recíproca é uma rede cúbica de corpo centrado (bcc - do inglês *body-centered cubic*), com a primeira zona de Brillouin sendo um octaedro truncado. Já na Fig. (2.1b) vemos vários pontos ou linhas de alta simetria desta primeira zona de Brillouin com notações específicas, por exemplo,  $\Gamma$ ,  $X$  ou  $L$ .

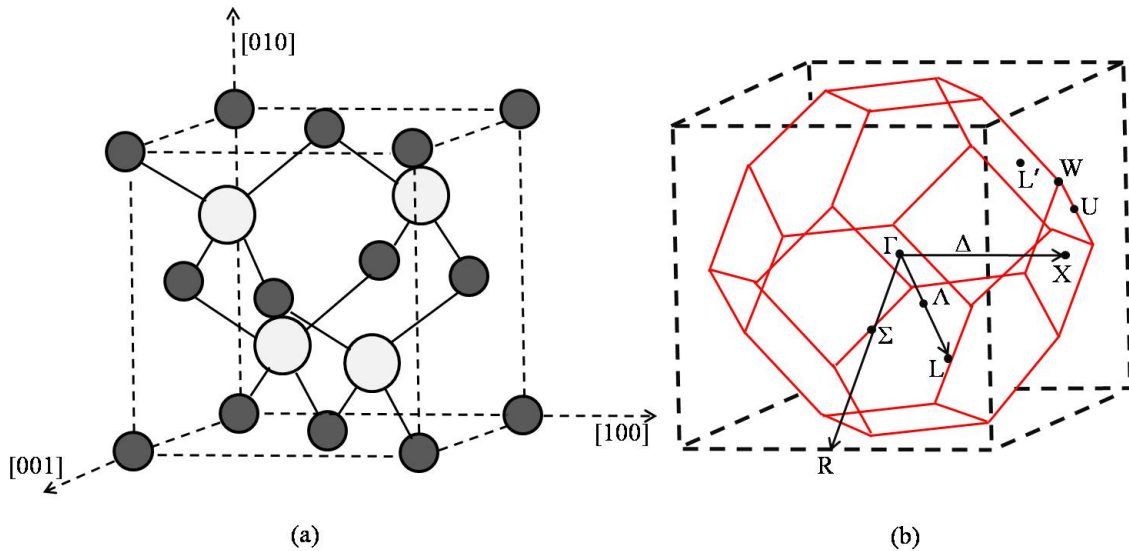


Figura 2.1: (a) Arranjo espacial dos átomos em uma estrutura blenda de Zinco; (b) Primeira zona de Brillouin de uma rede cúbica de face centrada (octaedro truncado). São mostrados também alguns pontos e linhas de alta simetria.

Nesses materiais o topo da banda de valência ocorre no centro da zona de Brillouin, que pode ser observado na Fig. (2.2a) representado pela letra grega  $\Gamma$ . Devido à presença do acoplamento spin-órbita, as três bandas de valência (que se originam dos orbitais  $p$  ligantes), têm sua degenerescência levantada. Surge assim um quadrupletto (simetria  $\Gamma_7$ ) com  $J = 1/2$ , onde  $J$  é o momento angular total. O extremo da banda de condução também se encontra no ponto  $\Gamma$  (ver Figuras 2.1b e 2.2a). A diferença energética entre o topo da banda de valência e o mínimo da banda de condução chama-se banda de energia proibida ou  $gap$  de energia,  $E_g$ . Existem materiais com o mínimo da banda de condução



próximo do ponto  $L$  ou  $X$  porém, neste trabalho, estamos interessados em materiais semicondutores com *gap* direto, isto é, aqueles em que o extremo da banda de condução ocorre no ponto  $\Gamma$ , tais como  $GaAs$ ,  $InAs$  e  $InGaAs$ .

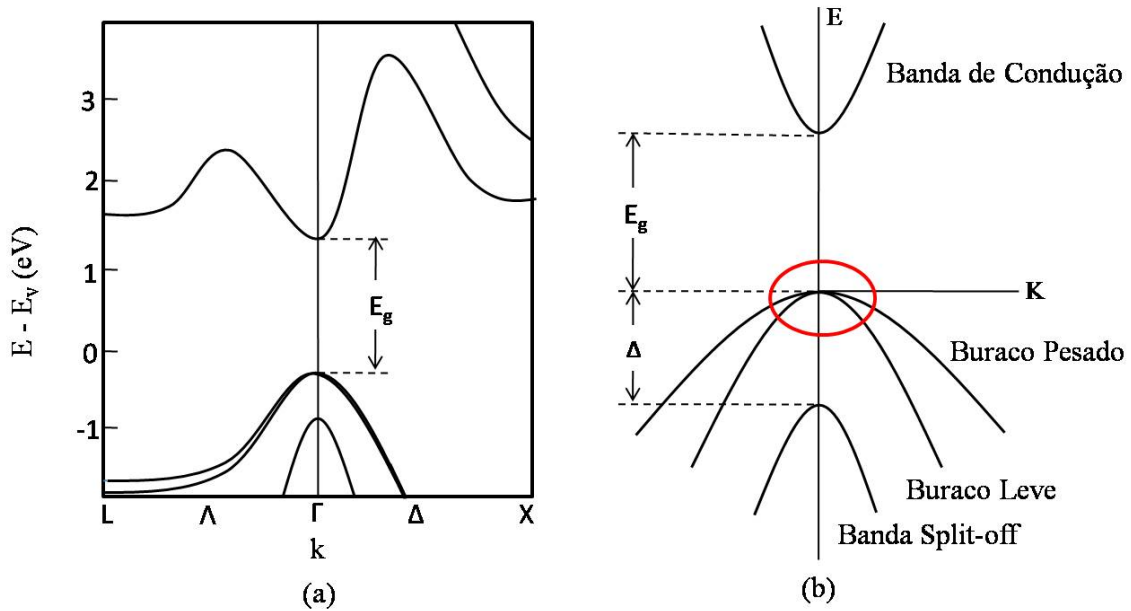


Figura 2.2: (a) Estrutura de banda do  $GaAs$  calculada pelo método pseudopotencial [27]; (b) Estrutura de banda em torno do ponto  $\Gamma$  para um semicondutor de *gap* direto mostrando as bandas de condução, buraco leve, buraco pesado e *split-off*.

### 2.1.3 Arseneto de Índio ( $InAs$ )

Assim como para o composto  $GaAs$ , os átomos de  $In$  e de  $As$  formam uma estrutura blenda de Zinco com oito elétrons de valência por célula unitária que contribuem para as ligações químicas. O  $InAs$  tem grande aplicação tecnológica, sendo empregado na confecção de detectores no infravermelho, além de apresentar alta mobilidade eletrônica e pequena energia de *gap* -  $0.36\text{ eV}$  a temperatura ambiente e  $0.42\text{ eV}$ , a  $0\text{ K}$  [26].

### 2.1.4 Arseneto de Gálio-índio ( $InGaAs$ )

É possível formar compostos ternários ou quaternários a partir dos compostos binários III-V ou II-VI. Do ponto de vista da estrutura eletrônica estas ligas não são cristalinas, pois o potencial produzido pela distribuição aleatória dos átomos nos sítios da rede não possui simetria de translação. Entretanto, podemos usar a aproximação de cristal virtual para descrever seus estados eletrônicos. Neste modelo o potencial real é trocado por um

potencial médio. Por exemplo, para um composto  $AB_{1-x}C_x$ , os átomos  $A$  se localizam sobre os sítios de uma das redes fcc enquanto os átomos  $B$  e  $C$  ocupam aleatoriamente os sítios da segunda rede fcc. Na aproximação de cristal virtual o potencial aleatório criado pelos átomos  $B$  e  $C$  é trocado por um potencial periódico médio. Usando esse procedimento a invariância de translação é restabelecida, o que permite falar em ondas de Bloch, massas efetivas, etc.

A variação da composição do sistema tem importantes impactos na estrutura eletrônica. No caso de sistemas nanoscópicos, tais variações afetam parâmetros como o gap de energia, cuja variação na escala das dimensões da estrutura estudada modulam o potencial efetivo de confinamento. É possível ajustar o *gap* do  $In_xGa_{1-x}As$  variando a concentração de  $In$  ou de  $Ga$ . A energia do *gap* em termos da concentração de Índio é dada pela seguinte equação [28]

$$E_g(\Gamma) = 0.422 + 0.7(1 - x) + 0.4(1 - x)^2, \quad (2.1)$$

onde  $x$  é a concentração de Índio. A continuação descreveremos os procedimentos para a caracterização da estrutura eletrônica de anéis quânticos formados por tais compostos.

## 2.2 Estrutura Eletrônica

A estrutura eletrônica de anéis quânticos está diretamente relacionada com suas propriedades morfológicas: geometria, composição, além de ser afetada pelos campos eletromagnéticos externos e tensões. As peculiaridades quânticas do confinamento quase-zero-dimensional aparecem claramente neste tipo de análise.

Para um potencial periódico a estrutura de bandas e as funções de onda são obtidas a partir do Hamiltoniano que satisfaz as simetrias do cristal. Na teoria de bandas a rede é suposta perfeita, com os átomos permanecendo fixos em seus sítios. Existem vários métodos para calcular a estrutura de bandas e as autofunções como, por exemplo, o método das ligações fortes, pseudopotencial, ondas planas ortogonalizadas, funções de Green e o método celular [29, 30]. Além da complexibilidade inerente a cada um deles, os altos custos de computação limitam sua utilização. Como exemplo mostramos na Fig. 2.2a a estrutura de banda do  $GaAs$  calculada pelo método pseudopotencial [27], onde podemos observar a energia de *gap* entre as bandas de condução e valência. Entretanto, nosso interesse aqui é calcular a estrutura eletrônica em torno dos extremos das bandas

de semicondutores com *gap* direto, onde tanto a energia do *gap* quanto a diferença entre as energias de buracos e a banda *split-off*,  $\Delta$ , são muito grandes comparadas à variação de energia entre as bandas de buraco leve e pesado, apresentadas na região circulada em vermelho na Fig. (2.2b). Para este propósito o método **k.p**, introduzido por Bardeen [31] e Seitz [32], se mostra extremamente útil. A seguir é apresentada a aproximação de massa efetiva e o método **k.p**.

### 2.2.1 A Aproximação de Massa Efetiva e o Método **k.p**

O nosso cálculo da estrutura de bandas está fundamentado na idéia de que um elétron propagando em uma rede atômica, influenciado por um potencial periódico, pode ser tratado através do conceito de massa efetiva,  $\mu^*$  [33]. Esta abordagem é descrita pelo método **k.p**, que se baseia na teoria de perturbação. Neste método são empregados vários parâmetros tais como o *gap* da banda proibida, energia *split-off*, os elementos de acoplamento das bandas de condução e valência, e as massas efetivas do elétron e buraco, etc. Esses parâmetros podem ser determinados precisamente por experimentos ópticos ou magneto-ópticos, e cálculos de primeiros princípios tornando o método uma ferramenta versátil. Outra grande vantagem do método **k.p** é o uso de uma base pequena, e um Hamiltoniano de fácil diagonalização e análise. Por isso, o método **k.p** possui importantes aplicações na simulação de propriedades ópticas, magnéticas e de transporte de semicondutores. De acordo com os estados eletrônicos a serem caracterizados, diferentes aproximações podem ser agregadas a este formalismo, das quais usaremos duas: a aproximação parabólica para a banda de condução e o chamado modelo de Luttinger para a banda de valência.

O método **k.p** permite o cálculo das estruturas de banda nas regiões próximas ao ponto de simetria  $\mathbf{k} = 0$  da rede recíproca (estados que participam na recombinação óptica). Basicamente o cálculo efetivo da estrutura de bandas divide-se em três passos: (i) transforma-se o Hamiltoniano do cristal para a representação **k.p**; (ii) reduz-se o problema para um problema matricial de autovalores; e (iii) introduz-se as aproximações.

Para a execução do primeiro passo, parte-se da equação de Schrödinger

$$\mathbf{H}_0\Psi(\mathbf{r}) = \mathcal{E}\Psi(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

na qual o portador de carga possui, além de sua energia cinética, a influência de um

potencial periódico,  $U(\mathbf{r})$

$$\mathbf{H}_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

sendo  $\mathbf{P}$  o operador momento linear,  $-i\hbar\nabla$  e  $m_0$  a massa do elétron em repouso.

Considerando o teorema de Bloch [34], a caracterização do movimento do portador de carga pode ser considerado restrito à primeira zona de Brillouin, região do espaço recíproco. As funções de onda da equação (2.2) são escritas como:

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

onde  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  contém a mesma periodicidade do potencial  $U(\mathbf{r})$ . Escrevendo o operador  $\mathbf{H}_0$  em termos da função de onda  $\mathbf{k}$ , ou seja,

$$H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{H}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.5)$$

e expandindo as exponenciais em série de Taylor

$$H(\mathbf{k}) = H_0 - i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}, \mathbf{H}_0] - \frac{1}{2} \sum_{ij} k_i k_j [r_i, [r_j, H_0]] + \dots \quad (2.6)$$

no qual o comutador  $[\mathbf{r}, H_0] = i\hbar\mathbf{P}/m_0$  e  $[\mathbf{r}, [\mathbf{r}, H_0]] = -i\hbar^2\delta_{ij}/m_0$  obtêm-se:

$$H(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}\cdot\mathbf{P}. \quad (2.7)$$

Aplicando (2.7) e (2.4) na equação (2.2), obtêm-se:

$$\left[ \frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}\cdot\mathbf{P} \right] u_{n\mathbf{k}} = \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}, \quad (2.8)$$

sendo  $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$  a energia da partícula para um certo vetor de onda  $\mathbf{k}$ , no qual  $n$  indica as possíveis bandas para este mesmo valor.

No ponto de alta simetria,  $\mathbf{k} = 0$ , os termos que dependem de  $\mathbf{k}$  na equação (2.8) se anulam. Assim é possível supor uma solução para a equação (2.8) nas mediações do ponto zero dada pela expansão

$$u_{n\mathbf{k}} = \sum_m C_m(\mathbf{k}) u_{m0}. \quad (2.9)$$

Inserindo a solução (2.9) na equação (2.8), multiplicando pelo complexo conjugado,  $u_{m0}^*$ , e integrando sobre todo o volume da célula unitária, obtêm-se:

$$\sum_m \left[ \left( \mathcal{E}_{n0} - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \right) \delta_{nm} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{2m_0} \cdot \langle n0 | \mathbf{P} | m0 \rangle \right] C_m(\mathbf{k}) = 0. \quad (2.10)$$

A diagonalização da equação (2.10) resulta na relação de dispersão  $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$  e na expansão dos coeficientes  $C_m(\mathbf{k})$  para todos os valores de  $\mathbf{k}$  e todas as bandas  $n$ .

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

$$C_n \sim 1; \quad C_m = \frac{\hbar \mathbf{k}}{2m_0} \cdot \frac{\mathbf{P}_{nm}}{\mathcal{E}_{n0} - \mathcal{E}_{m0}}, \quad (2.11)$$

que substituído na equação (2.10), fornece a correção de segunda ordem na energia  $\mathcal{E}_{n0}$ ,

$$\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} = \mathcal{E}_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{|\mathbf{P}_{nm} \cdot \mathbf{k}|^2}{\mathcal{E}_{n0} - \mathcal{E}_{m0}}. \quad (2.12)$$

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

$$\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} = \mathcal{E}_{n0} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j} k_i \frac{1}{\mu_n^{ij}} k_j, \quad (2.13)$$

na qual os índices  $i, j$  referem-se as coordenadas  $x, y, z$  e  $\mu_n^{ij}$  ao tensor de massa efetiva, definido como [34]

$$\frac{1}{\mu_n^{ij}} = \frac{1}{m_0} \delta_{ij} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{n \neq m} \frac{P_{nm}^i P_{nm}^j}{\mathcal{E}_{n0} - \mathcal{E}_{m0}}. \quad (2.14)$$

Em (2.14), a massa efetiva é determinada pelo efeito de acoplamento de outras bandas. Entre as bandas remotas, geralmente apenas uma banda ou um conjunto de bandas (degeneradas) têm o acoplamento mais forte. Para um semicondutor de *gap* direto, o acoplamento da banda de valência é dominante. Se desprezarmos o acoplamento das outras bandas, então a soma em (2.12) tem somente um termo com o denominador sendo o *gap* da banda ( $E_g$ ). Se o *gap* da banda é pequeno, a massa efetiva também será pequena. Esta é a razão pela qual semicondutores de *gap* estreito, também possuem massa efetiva pequena para o elétron.

O resultado obtido para o tensor de massa efetiva (Eq.2.14) leva em consideração apenas o termo cinético do portador de carga e o potencial periódico da rede cristalina. Porém, a correção relativística de spin-órbita pode ser introduzida ao Hamiltoniano do sistema, alterando apenas o operador  $\mathbf{P}$  para  $\pi$ , definido como

$$\pi = \mathbf{P} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U). \quad (2.15)$$

Na equação (2.15) o termo  $\boldsymbol{\sigma}$  é um vetor cujas três componentes são as matrizes de Pauli [34, 36].

Tabela 2.1: *Gap* da banda de valência, massa efetiva do elétron, e suas relações numéricas para alguns semicondutores de *gap* direto, valores extraídos da referência [35]

Material	$E_g(0K)(eV)$	$\mu_n^{ij}(m_0)$
<i>GaAs</i>	1.52	0.067
<i>InP</i>	1.42	0.076
<i>GaSb</i>	0.81	0.041
<i>InAs</i>	0.42	0.024
<i>InSb</i>	0.24	0.014

O modelo mais básico para o cálculo da estrutura de bandas de um semicondutor é o modelo parabólico, tanto para a banda de valência ( $v$ ) como para a banda de condução ( $c$ ). Neste caso se assume o tensor de massa efetiva como isotrópico levando a Eq. (2.13) a

$$\mathcal{E}_c(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_c}, \quad (2.16)$$

para a banda de condução, e

$$\mathcal{E}_v(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_v}, \quad (2.17)$$

para a banda de valência, onde  $\mathbf{k}$  é o vetor de onda,  $\mathcal{E}_g$  é a energia do *gap*, e  $\mu_{c/v}$  são as massas efetivas da banda de condução e valência [37].

Para a banda de condução, tal aproximação pode ser procedente e será utilizada em nossa abordagem da estrutura eletrônica dos anéis quânticos. 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 ( $hh$ ) se fazem necessárias.

Como introduzido acima, a descrição da estrutura eletrônica está baseada no teorema de Bloch e é aplicável a sistemas volumétricos (*bulk*), porém sua abrangência se estende até sistemas nanoscópicos, tais como poços quânticos, nanofios, nanoanéis e pontos quânticos, onde propriedades de simetria cristalinas ainda prevalecem. Para isso, será usada a aproximação da função envelope [34]. Nesse caso, na presença de um campo,  $V(r)$ , de

variação “suave” na escala da célula primitiva do cristal a Eq. (2.10) torna-se

$$\sum_m \left[ \left( \mathcal{E}_{n0} - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} + V(r) \right) \delta_{nm} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{2m_0} \cdot \langle n0 | \mathbf{P} | m0 \rangle \right] C_m(\mathbf{k}) = 0, \quad (2.18)$$

procedendo da mesma forma que foi feito para obter as Eqs. (2.16 e 2.17), ficamos com

$$H_c = \mathcal{E}_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_c} + V(r). \quad (2.19)$$

para a banda de condução. Trocando  $\mathbf{k}$  (antes um número), pelo operador diferencial  $-i\nabla$ , a aproximação parabólica o Hamiltoniano efetivo escreve-se como

$$H_c = \mathcal{E}_g - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu_c} + V(r). \quad (2.20)$$

Na presença de um campo magnético,  $\mathbf{B}$ , o operador,  $\hat{P} = -i\hbar\nabla$ , deve ser substituído por  $(\hat{P} - q\mathbf{A}/c)$  sendo  $q$  a carga do portador, (neste caso,  $q = -e$ ) e  $\mathbf{A}$  o vetor potencial, tal que  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ , resulta em

$$H_c = \mathcal{E}_g + \frac{1}{2\mu_c} \left( \hat{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(r). \quad (2.21)$$

Como nosso problema trata apenas um anel quântico perfeitamente cilíndrico, sua simetria axial torna a solução do problema mais simples quando usamos coordenadas cilíndricas, desta forma,  $\hat{P} = \hat{P}_{r\varphi} + \hat{P}_z$ , onde

$$\hat{P}_{r\varphi} = -i\hbar \left[ \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \quad (2.22)$$

$$\hat{P}_{r\varphi}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (2.23)$$

e

$$\hat{P}_z = -i\hbar \partial / \partial z. \quad (2.24)$$

Na próxima seção apresentaremos o modelo de Luttinger e os outros casos mais específicos, que se baseiam no método  $\mathbf{k.p}$ .

## 2.2.2 Hamiltoniano de Luttinger

A localização dos portadores (elétrons e buracos) nas proximidades dos extremos das bandas torna esta região muito importante para o estudo das propriedades eletrônicas e ópticas nos materiais semicondutores. Este fato nos permite também fazer simplificações no cálculo da estrutura eletrônica. Nesta aproximação leva-se em consideração a interação

entre as bandas, os efeitos de não parabolicidade e efeitos de *spin*, que são essenciais para obter as propriedades eletrônicas de nanoestruturas semicondutoras. Dentre os métodos matriciais análogos, o modelo de Kane mais simples [38, 39] resulta em um Hamiltoniano 8 x 8, que deve ser usado sempre que estivermos estudando materiais com *gaps* de energia tais que a interação entre as bandas de condução ( $\Gamma_6$ ), valência ( $\Gamma_8$ ) e *split-off* ( $\Gamma_7$ ) não puderem ser desprezadas. Existem outras aproximações úteis quando os efeitos de acoplamento entre as bandas de condução e valência puderem ser desprezados. Assim o Hamiltoniano resultante pode ser 6 x 6 (modelo de Luttinger-Kohn) e quando também não houver praticamente acoplamento entre as bandas de valência e *split-off*, resultará em um Hamiltoniano 4 x 4 (modelo de Luttinger) para a descrição apenas do topo da banda de valência.

Nesta seção, será introduzido o modelo de Luttinger [40], com base no método **k.p.** Com isto, objetiva-se construir um modelo simples, mas eficiente, para o cálculo da banda de valência em nanoanéis semicondutores. A solução obtida na Eq. (2.10) fornece o cálculo exato das bandas de energia em qualquer ponto da zona de Brillouin, porém a região de interesse deste trabalho, como já foi dito anteriormente, se restringe apenas às proximidades de  $k = 0$ . Utilizando o método desenvolvido por Löwdin [41], que tratou o problema via teoria de perturbação e diagonalização exata, Luttinger obteve seu Hamiltoniano ( $H_L$ ) levando em consideração apenas aspectos de simetria para o cálculo da banda de valência [42].

Nesse caso, a representação do Hamiltoniano para o anel quântico na presença de um campo magnético é o operador matriz 4 x 4:

$$H_L^{ij} = H_K^{ij} + V(r) \delta_{ij} \quad (2.25)$$

onde  $H_K$  é a energia cinética dos buracos, dado pelo Hamiltoniano de Luttinger na aproximação axial [40], ele descreve a dispersão da banda de valência  $\Gamma_8$ , e inclui o campo magnético aplicado na direção  $z$ . O potencial de confinamento  $V(r)$  para os buracos pesados e leves é incluído nos elementos diagonais da matriz  $H_K$ .

O Hamiltoniano  $H_K$  é representado na base dos autoestados do momento angular:

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} |(X + iY) \uparrow\rangle \quad (2.26)$$

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}} |(X + iY) \downarrow\rangle - 2 |Z \uparrow\rangle \quad (2.27)$$



$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow\rangle + 2|Z \downarrow\rangle \quad (2.28)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{i}{2} |(X - iY) \downarrow\rangle \quad (2.29)$$

e escreve-se como:

$$H_K = \begin{pmatrix} a_+^{hh\uparrow} & b_- & c_- & 0 \\ b_+ & a_-^{lh\uparrow} & 0 & c_- \\ c_+ & 0 & d_-^{lh\downarrow} & b_- \\ 0 & c_+ & b_+ & d_+^{hh\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

Na simbologia  $hh \uparrow$ ,  $lh \uparrow$ ,  $lh \downarrow$  e  $hh \downarrow$  usada, as setas representam os *spins* para cima ( $\uparrow$ ) e para baixo ( $\downarrow$ ). Os elementos de matriz são expressados por:

$$a_{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 \mp 2\gamma_2)k_z^2 - \frac{\hbar^2}{4m_0}(\gamma_1 \pm \gamma_2)(k_+k_- + k_-k_+) \\ + \frac{(2 \pm 1)}{2}\hbar\omega_e \left( \kappa + \frac{(5 \pm 4)}{4}q \right), \quad (2.31)$$

$$d_{\pm} = a_{\pm} - \frac{(2 \pm 1)}{2}\hbar\omega_e \left( \kappa + \frac{(5 \pm 4)}{4}q \right), \quad (2.32)$$

$$b_{\mp} = \hbar^2 \frac{\sqrt{3}}{4m_0} \gamma_3 k_z k_{\mp}, \quad (2.33)$$

$$c_{\mp} = \hbar^2 \frac{\sqrt{3}}{4m_0} (\gamma_2 + \gamma_3) k_{\mp}^2 \quad (2.34)$$

onde a frequência ciclôtrônica  $\omega_e$  é dada por  $\omega_e = \frac{eB}{m_0}$  e as letras  $q$ ,  $\kappa$  e  $\gamma_{\alpha}$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ) chamados de parâmetros de Luttinger. Os parâmetros  $q$  e  $\kappa$  são devidos à contribuição de Zeeman, já os  $\gamma_{\alpha}$  são definidos por Kane [43, 24] a partir de  $(L', M, N')$ , como:

$$\gamma_1 = -\frac{2m_0}{3\hbar^2}(L' + 2M) - 1 \quad (2.35)$$

$$\gamma_2 = -\frac{m_0}{3\hbar^2}(L' - M) \quad (2.36)$$

$$\gamma_3 = -\frac{m_0}{3\hbar^2}N' \quad (2.37)$$

onde

$$L' = F' + 2G; \quad (2.38)$$

$$M = H_1 + H_2; \quad (2.39)$$

$$N' = F' - G + H_1 - H_2, \quad (2.40)$$

com

$$G = \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{ij} \frac{|\langle x | p_x | n\Gamma_{3j} \rangle|^2}{E_v - E_{n,\Gamma_3}}; \quad (2.41)$$

$$F' = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{ij} \frac{|\langle x | p_x | n\Gamma_{1j} \rangle|^2}{E_v - E_{n,\Gamma_1}}; \quad (2.42)$$

$$H_1 = \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{ij} \frac{|\langle x | p_x | n\Gamma_{5j} \rangle|^2}{E_v - E_{n,\Gamma_5}}; \quad (2.43)$$

$$H_2 = \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{ij} \frac{|\langle x | p_x | n\Gamma_{4j} \rangle|^2}{E_v - E_{n,\Gamma_4}}. \quad (2.44)$$

Estes termos podem ser calculados a partir de primeiros princípios ou os parâmetros  $\gamma_\alpha$  também podem ser obtidos experimentalmente através da análise das massas efetivas. Os valores dos parâmetros utilizados neste trabalho para o cálculo efetivo das bandas de valência de anéis de *InAs* estão dispostos da tabela 2.2.

Tabela 2.2: Parâmetros de Luttinger para o *InAs* e *GaAs*, extraídos da referência [44]

	InAS	GaAs
$\gamma_1$	20.40	6.85
$\gamma_2$	8.30	2.10
$\gamma_3$	9.10	2.90
$\kappa$	7.60	1.20
$q$	0.39	0.01

Os operadores  $k$  devem ser escritos em coordenadas polares a partir de (2.22 - 2.24), como:

$$k_{\mp} = -ie^{\mp i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial r} \mp \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \pm \frac{m_0\omega_e}{2\hbar} r \right), \quad (2.45)$$

e

$$k_z = -i \frac{\partial}{\partial z}. \quad (2.46)$$

Juntando o Hamiltoniano  $H_K$  com o potencial  $V(r)$ , obtemos o Hamiltoniano  $H_L$  da Eq. (2.25):

$$H_L = \begin{pmatrix} a_+^{hh\uparrow} + V(r) & b_- & c_- & 0 \\ b_+ & a_-^{lh\uparrow} + V(r) & 0 & c_- \\ c_+ & 0 & d_-^{lh\downarrow} + V(r) & b_- \\ 0 & c_+ & b_+ & d_+^{hh\downarrow} + V(r) \end{pmatrix}. \quad (2.47)$$

A operador Hamiltoniano  $H_L$  será usado nos cálculos da estrutura eletrônica da banda de valência de um anel quântico não tensionado. Para cálculos que levam em conta efeitos de tensão neste tipo de nanoestrutura devemos introduzir em  $H_L$  os efeitos de *strain*, que serão apresentados na seção seguinte.

### 2.2.3 Efeitos de *Strain*

Principal responsável pela transição ocorrida de pontos quânticos para anéis quânticos, o *strain* causado pela incompatibilidade existente entre superfícies de heteroestruturas semicondutoras com parâmetros de rede diferentes, afeta as propriedades eletrônicas modulando as bandas de energia. Daí a importância de considerarmos seus efeitos em nossos cálculos.

Quando há *stress* aplicado em um semicondutor, a deformação do cristal resulta em deslocamentos dos níveis de energia [45, 46, 47]. A pressão externa e o *strain* são poderosas ferramentas para estudar a estrutura de bandas de semicondutores.

A aplicação do *stress* em um cristal diminui a simetria do potencial cristalino,  $V_0$ , fazendo com que a expansão de um sistema perturbado não seja possível [47]. Entretanto, isto é importante para introduzirmos um sistema de coordenadas deformadas

$$r'_i = \sum_j (\delta_{ij} - \varepsilon_{ij}) r_j, \quad (2.48)$$

que implica em

$$p'_i = \sum_j (\delta_{ij} + \varepsilon_{ij}) p_j, \quad (2.49)$$

$$k'_i = \sum_j (\delta_{ij} + \varepsilon_{ij}) k_j. \quad (2.50)$$

Aqui  $\varepsilon$  denota o tensor *strain*. A rede de Bravais de um cristal sob *strain* no novo sistema de coordenadas coincide com a de um cristal sem *strain* no sistema de coordenadas antigo.

Retornando para a antiga notação, e fazendo a seguinte modificação  $r' \rightarrow r$ , o potencial do cristal deformado,  $V_\varepsilon[(1 + \varepsilon)r]$  tem a mesma periodicidade do potencial não

perturbado  $V_0(r)$ . Portanto, podemos expandir  $V_\varepsilon(r)$  em uma série de termos de  $\varepsilon$ ,

$$V_\varepsilon[(1 + \varepsilon)r] = V_0(r) + \sum_{ij} V_{ij}(r)\varepsilon_{ij} + \dots, \quad (2.51)$$

onde

$$V_{ij} = \frac{1}{2 - \delta_{ij}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{V_\varepsilon[(1 + \varepsilon)r] - V_0(r)}{\varepsilon_{ij}}. \quad (2.52)$$

Restringindo-nos a termos lineares do *strain*, obtemos, em vez da Eq. (2.8), uma expressão que considera os efeitos do *strain*, dada por

$$\left[ \frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} + V_0(r) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P} + \sum_{ij} \left( -\frac{\mathbf{P}_i \mathbf{P}_j}{m_0} + V_{ij} \right) \varepsilon_{ij} - \frac{\hbar^2}{m_0} \mathbf{k} \varepsilon \mathbf{k} - \frac{2\hbar}{m_0} \mathbf{k} \varepsilon \mathbf{P} \right] u_{n\mathbf{k}} = \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}. \quad (2.53)$$

Resolvendo a Eq. (2.53) de forma análoga a Eq. (2.8), obtemos uma expressão semelhante às Eqs. (2.16 e 2.17), porém como o termo responsável pelo deslocamento causado pelo *strain*. Os mais importantes elementos de matriz proporcionais a  $\varepsilon$  são

$$\nu_{ij\nu\nu'} = \left\langle \nu\sigma \left| -\frac{\mathbf{P}_i \mathbf{P}_j}{m_0} + V_{ij} \right| \nu'\sigma' \right\rangle, \quad (2.54)$$

chamados de potenciais de deformação [44].

A relação entre *stress* e *strain* foi identificada por Robert Hook [48]. A lei de Hook da elasticidade em uma aproximação em que uma quantidade de material de um corpo é deformada (o *strain*) é linearmente considerada a força causadora da deformação (*stress*). A relação mais geral entre *strain* e *stress* pode ser escrita como:

$$\tau_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{ij} \quad (2.55)$$

onde  $c_{ijkl}$  é um tensor de rigidez elástica de quarta ordem contendo 81 coeficientes. Entretanto, dependendo da simetria do cristal o número de coeficientes pode ser reduzido. Para cristais com simetria cúbica, tipo blenda de Zinco, como *InAs* e *GaAs*, os coeficientes não nulos são apenas três:  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  e  $c_{44}$ . Estes coeficientes são conhecidos como constantes de rigidez. A generalização da lei de Hook, para cristais com simetria cúbica, na forma

matricial, pode ser escrito como [49]:

$$\begin{pmatrix} \tau_{11} \\ \tau_{22} \\ \tau_{33} \\ \tau_{23} \\ \tau_{31} \\ \tau_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix}. \quad (2.56)$$

Para um sistema com simetria axial com o eixo de simetria ao longo da direção  $z = 3$  (em nosso caso ao longo da direção cristalográfica [100]), as componentes do *strain* são dadas por:

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_{\parallel}, \quad \varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{33}. \quad (2.57)$$

Na ausência de *stress* externo uniaxial (ao longo de  $z$ ), onde  $\tau_{33} = 0$ , e de acordo com a Eq. (2.56), podemos obter a relação entre as diferentes componentes

$$\varepsilon_{\perp} = -\frac{2c_{12}}{c_{11}}\varepsilon_{\parallel}. \quad (2.58)$$

A variação das componentes paralela  $\varepsilon_{\parallel}$  e perpendicular  $\varepsilon_{\perp}$  do *strain* são responsáveis pelas deformações que ocorrem ao longo do eixo  $z$  ou perpendicular a ele, respectivamente. Assim, quando a componente  $\varepsilon_{\parallel}$  é positiva,  $\varepsilon_{\perp}$  é negativa, ou seja, ao comprimirmos uma direção, expandimos a outra. Agora que conhecemos a relação entre *stress* e *strain*, apresentaremos o Hamiltoniano de Luttinger que inclui os termos de *strain*

$$H_K^D = \begin{pmatrix} a_+^{hh\uparrow} + \Delta E_{hh} & b_- & c_- & 0 \\ b_+ & a_-^{lh\uparrow} + \Delta E_{lh} & 0 & c_- \\ c_+ & 0 & d_-^{lh\downarrow} + \Delta E_{lh} & b_- \\ 0 & c_+ & b_+ & d_+^{hh\downarrow} + \Delta E_{hh} \end{pmatrix}, \quad (2.59)$$

onde, para a subbanda  $hh$ , na direção [001], a expressão é dada por:

$$\Delta E_{hh} = -(P + Q) = -\frac{1}{2} [\beta_1(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp})] - \beta_2\varepsilon_{\parallel\perp} \quad (2.60)$$

e para o  $lh$ , por:

$$\Delta E_{lh} = -(P - Q) = -\frac{1}{2} [\beta_1(2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp})] + \beta_2\varepsilon_{\parallel\perp} \quad (2.61)$$

onde  $\beta_1 = -2a_v$  e  $\beta_2 = b$ .

As bandas de valência  $hh$  e  $lh$  de um semiconductor cúbico são separadas como mostra a Fig. (2.3). De acordo com o sinal do *strain* o deslocamento relativo das subbandas de  $hh$  e  $lh$  pode mudar drasticamente a estrutura eletrônica. Ao afetar a posição relativa das subbandas, o acoplamento entre estas será certamente afetado. Os parâmetros necessários

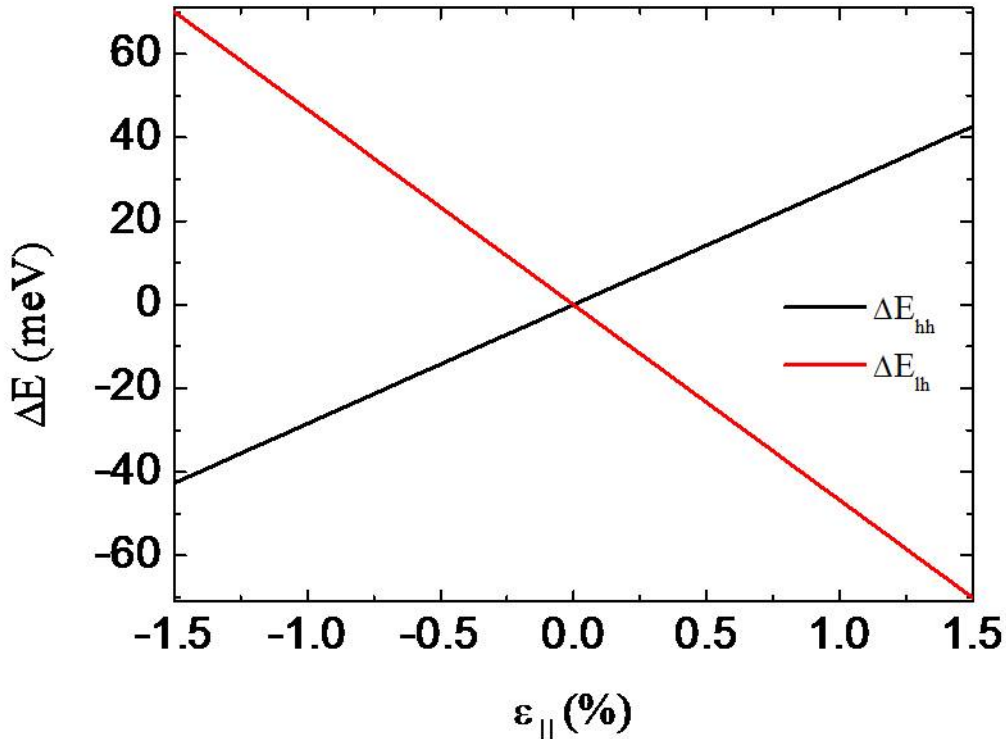


Figura 2.3: Variação da energia do *gap* em função da componente paralela do *strain*.

para os cálculos destes deslocamentos estão apresentados na tabela 2.3.

Tabela 2.3: Parâmetros do *InAs*, extraídos da referência [50]

$a_v$	-1.0 eV
$b$	-1.8 eV
$c_{11}$	832.9 GPa
$c_{12}$	452.6 GPa

Outro fator determinante no posicionamento relativo das subbandas de  $hh$  e  $lh$  é o confinamento anisotrópico que induzirá deslocamentos energéticos diferentes devido às massas efetivas diferentes. Assim, para a descrição da estrutura eletrônica dos anéis quânticos é importante conhecer os detalhes sobre sua morfologia. A Fig. (2.4) apresenta a

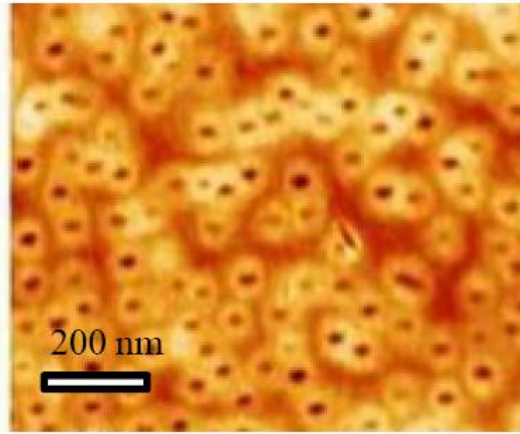


Figura 2.4: Imagens de anéis quânticos de  $InGaAs$  auto-organizados caracterizados por microscopia de força atômica (AFM). [51]

morfologia de uma amostra de QRs usando microscopia de força atômica (AFM - do inglês *atomic force microscopic*). Os modelos teóricos estarão baseados nos dados estruturais obtidos a partir da caracterização experimental destes sistemas. Nesta figura, o diâmetro aparente dos anéis sem a camada tampão é da ordem de  $70\text{ nm}$  porém após o recobrimento a morfologia dos anéis é alterada e o potencial efetivo de confinamento também.

Após o recobrimento com a camada tampão o confinamento efetivo fica reduzido a uma região bem próxima do centro do anel, como ilustrado na Fig. (2.5) [13]. Além disso, o valor da concentração de  $In$  máximo, apresentado nesta figura, será usado posteriormente no ajuste do  $gap$  de energia em função da posição. A discussão sobre o potencial efetivo de

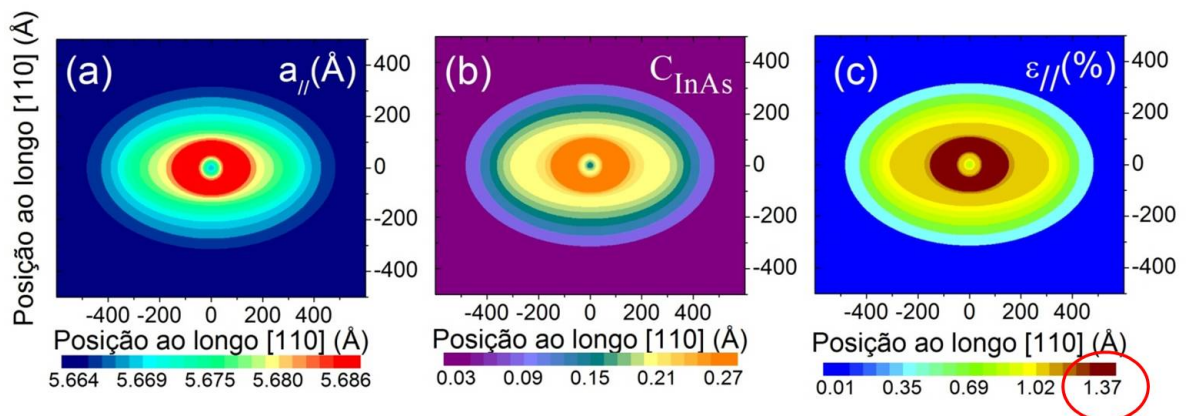


Figura 2.5: Projeções no plano do parâmetro de rede para anéis quânticos (a). (b) Mostra a representação da concentração de Índio para cada região do parâmetro de rede dos anéis. A projeção da deformação elástica no plano, obtida através da consideração do desvio do parâmetro de rede medido pela relaxação na concentração da liga, é mostrada no painel (c).

confinamento 3D será apresentada mais adiante. No caso particular da caracterização dos

campos de *strain*, usamos os dados representados nesta figura. Optamos por introduzir o *strain* como um parâmetro fixo, cujo valor é  $\varepsilon_{\parallel} = 1.37\%$ , valor circulado em vermelho na Fig. (2.5c), que foi escolhido pois há uma probabilidade maior do portador ser encontrado na região correspondente a esse valor máximo do *strain*. Assim a contribuição à separação, em  $k_z = 0$ , entre níveis de buracos leve e pesado, devido à tensão, são respectivamente, em módulo, iguais à:  $|\Delta E_{lh}| = 63.97$  meV e  $|\Delta E_{lh}| = 38.95$  meV.



# Capítulo 3

## BANDA DE CONDUÇÃO

Neste capítulo faremos um estudo do comportamento da estrutura eletrônica da banda de condução observando como seus níveis de energia variam na presença de um campo magnético aplicado. Nesta análise aplicaremos a aproximação parabólica para caracterizar os estados confinados em um anel quântico de *InAs*. Para isso, apresentaremos dois modelos que podem ser usados para calcular a estrutura eletrônica de anéis quânticos, primeiro apresentaremos o modelo mais simples (Modelo 1D) usado nas Ref. [21, 22, 23], em seguida apresentaremos um modelo (Modelo 3D), o qual requer um pouco mais de atenção devido à maior quantidade de detalhes que serve como referência para os efeitos da modulação do confinamento tridimensional.

### 3.1 Modelo 1D

O problema de um elétron confinado em um anel quântico unidimensional, ou seja, problema com um único grau de liberdade resulta em uma aproximação conveniente, dada sua simplicidade. Ele é usado comumente para a descrição de fenômenos qualitativos relacionados com a estrutura eletrônica de estados confinados em anéis [51]. Para isso, partimos da idéia de que este anel é uma "linha fechada", onde elétrons são confinados em um círculo de raio  $R$ , como mostra a Fig. (3.1).

Para um anel quântico unidimensional com um campo magnético uniforme aplicado  $B$ , perpendicular ao plano do anel, usamos o gauge  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B \cdot R\hat{\varphi}$ , pois ele representa suficientemente bem o campo aplicado, além de permitir a solução analítica do Hamiltoniano.

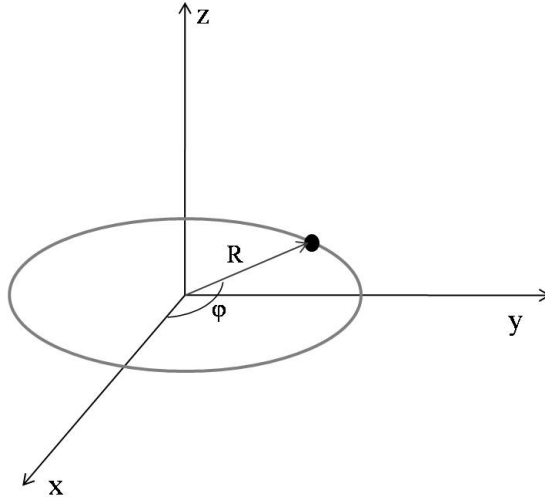


Figura 3.1: Representação de um anel usado nos cálculos do Modelo 1D.

Substituindo o operador  $\hat{P}$  em coordenadas cilíndricas (2.22) e o gauge acima no Hamiltoniano (2.21) obtemos:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2\mu R^2} \left[ -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{eBR^2}{c} \right]^2, \quad (3.1)$$

onde consideramos somente o grau de liberdade angular.

### 3.1.1 O Elétron em um Anel Quântico Unidimensional

Usaremos o Hamiltoniano (3.1) apresentado do Modelo 1D, aplicado na equação de Schrödinger,  $(\mathbf{E} - \mathbf{H})\Psi = 0$ , para obter a expressão para as autoenergias do Modelo 1D. Expandindo o termo ao quadrado, obtêm-se

$$\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{ieB}{4\mu} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} - \frac{e^2 B^2 R^2}{8\mu c^2} \Psi + E\Psi = 0, \quad (3.2)$$

dividindo tudo por  $\hbar^2/2\mu R^2$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{ieBR^2}{2\hbar c} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} - \left( \frac{e^2 B^2 R^4}{4c^2 \hbar^2} - \frac{2\mu R^2 E}{\hbar^2} \right) \Psi = 0. \quad (3.3)$$

Introduzindo o fluxo  $\Phi = \pi R^2 B$  e o quantum de fluxo magnético,  $\Phi_0 = hc/e$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{i\Phi}{\Phi_0} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} - \left( \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} - \frac{2\mu R^2 E}{\hbar^2} \right) \Psi = 0, \quad (3.4)$$

cuja solução é do tipo

$$\Psi(\varphi) = C e^{im\varphi}, \quad (3.5)$$

normalizando obtemos o valor da constante  $C = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}$ , o que nos dá

$$\Psi(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (3.6)$$

Para obter os autovalores, substituímos a equação (3.6) na equação (3.4)

$$-m^2 \left( \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \right) + \frac{-m\Phi}{\Phi_0} \left( \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \right) - \left( \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} - \frac{2\mu R^2 E}{\hbar^2} \right) \left( \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \right) = 0, \quad (3.7)$$

$$-m^2 - \frac{m\Phi}{\Phi_0} - \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} + \frac{2\mu R^2 E}{\hbar^2} = 0, \quad (3.8)$$

as auto-energias são dadas pela equação (3.9)

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left( m^2 + \frac{m\Phi}{\Phi_0} + \frac{\Phi^2}{\Phi_0^2} \right), \quad (3.9)$$

ou

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \left( m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2. \quad (3.10)$$

com  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

### 3.1.2 Resultados do Anel Unidimensional

Apresentaremos agora, as curvas de energia resultantes da Eq. (3.10).

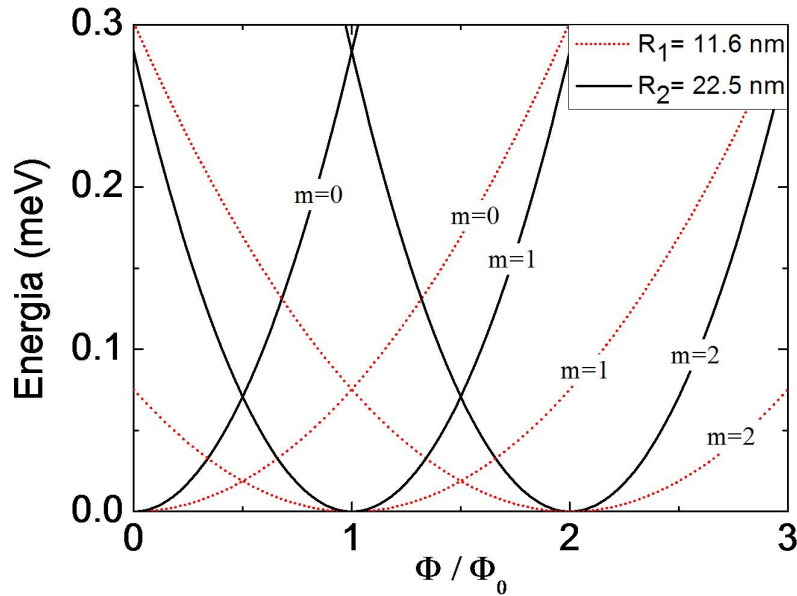


Figura 3.2: Estados de energia do anel unidimensional para dois valores do raio em função do fluxo magnético.

Na Fig. (3.2) aparecem os níveis de energia dos estados confinados no anel unidimensional para dois valores do raio (estes valores de raio correspondem a valores nominais reportados experimentalmente [51]). Nesta figura é possível observar o deslocamento dos níveis de energia para cada valor de  $m$ . Assim, para um mesmo valor de  $m$  os mínimos para os dois tamanhos de anel coincidem pois são determinados exclusivamente pelo fluxo magnético relativo que atravessa o anel. Neste modelo, a estrutura eletrônica possui propriedades periódicas com período  $\Phi = \Phi_0$ . Além disso, a Fig. (3.2) também mostra que os cruzamentos entre os níveis de energia ocorrem nos mesmos valores de  $\Phi/\Phi_0$  tanto para anéis com raio  $R_1$  quanto  $R_2$ . O valor do raio determina o valor absoluto de energia onde tais cruzamentos acontecem.

## 3.2 Modelo 3D

Para o anel tridimensional, podemos separar o problema em duas partes, um problema bidimensional descrito pela função de onda  $\Lambda(r, \varphi)$  e um problema unidimensional descrito por  $F(z)$ , resultando na função  $\Psi(r, \varphi, z) = \Lambda(r, \varphi)F(z)$ . O mesmo se aplica às autoenergias, dadas pela soma da parte bidimensional (plano  $r\varphi$ ) com a parte em  $z$ . Desta forma, na presença de um campo magnético uniforme  $B$  (perpendicular ao plano do anel), usaremos o mesmo gauge apresentado no modelo 1D. Como  $\mathbf{A}$  está contido no plano  $r$ - $\varphi$ , separemos o Hamiltoniano em duas partes, uma com a componente  $z$  e a outra com as componentes  $r$  e  $\varphi$ , isso é feito através da separação do operador  $\hat{P}$ , com isso, o Hamiltoniano na equação (2.21) pode ser reescrito como:

$$\hat{H} = \hat{H}_{r\varphi} + \hat{H}_z, \quad (3.11)$$

onde

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left( \hat{P}_{r\varphi} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V_{r\varphi} + \left( \frac{\hat{P}_z^2}{2\mu} + V_z \right), \quad (3.12)$$

com

$$\hat{H}_{r\varphi} = \frac{1}{2\mu} \left( \hat{P}_{r\varphi}^2 + \frac{e}{c} \mathbf{A} \hat{P}_{r\varphi} + \hat{P}_{r\varphi} \frac{e}{c} \mathbf{A} + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2 \right) + V_{r\varphi}. \quad (3.13)$$

e

$$\hat{H}_z = \left( \frac{\hat{P}_z^2}{2\mu} + V_z \right). \quad (3.14)$$

Como consequência da separação do Hamiltoniano, vamos calcular a parte no plano  $r\varphi$ , deixando a parte em  $z$  que possui solução mais simples para o final desta seção.

Das equações 2.22 e 2.23, temos que:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{r\varphi} = & \frac{1}{2\mu} \left[ -\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{e}{c} \left( \frac{Br}{2} \hat{\varphi} \right) i\hbar \left( \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right. \\ & \left. - i\hbar \left( \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\varphi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left( \frac{Br}{2} \hat{\varphi} \right) \frac{e}{c} + \frac{e^2}{c^2} \left( \frac{Br}{2} \hat{\varphi} \right)^2 \right] + V_{r\varphi} \end{aligned} \quad (3.15)$$

usando as relações

$$\frac{\partial \hat{r}}{\partial r} = \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial r} = 0; \quad \frac{\partial \hat{r}}{\partial \varphi} = \hat{\varphi} \quad \text{e} \quad \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \varphi} = -\hat{r} \quad (3.16)$$

$$\hat{H}_{r\varphi} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{ieB}{2c\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 B^2 r^2}{4c^2 \hbar^2} \right] + V_{r\varphi}. \quad (3.17)$$

Para a parte em  $z$  usaremos a função de onda e as autoenergias de um poço de barreiras infinitas que serão apresentados posteriormente.

Quanto ao potencial  $V_{r\varphi}$ , sua escolha torna-se uma tarefa crítica. O problema de um anel tridimensional tratado aqui parte de um modelo bidimensional proposto pelo Landau na Ref. [52]. Neste caso, no plano do anel será aplicado um potencial do tipo

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0 \quad \text{com} \quad V_0 = 2\sqrt{a_1 a_2}. \quad (3.18)$$

em coordenadas cilíndricas ilustrado na Fig. (3.3).

A solução da equação de Schrödinger para este tipo de confinamento bidimensional está fornecida na Ref. [53] e foi usada por Tan e Inkson para resolver o problema do elétron confinado em anéis em campos magnéticos na aproximação parabólica. Um dos objetivos desta dissertação consistiu na solução deste problema, não disponível de forma explícita na literatura. Isto foi essencial, pois durante este trabalho detectamos erros nesta última referência que foram corrigidos e serão divulgados tanto aqui, quanto em nossos artigos.

Na equação (3.18),  $a_1$  e  $a_2$  são parâmetros que definem as dimensões do anel, a variação desses parâmetros permite ajustar tanto o raio (3.19) do anel quanto sua largura (3.23), como é mostrado na Fig. (3.3).

Derivando a equação (3.18) e dividindo ambos os lados por  $r$ , determina-se o valor de  $r$  onde o potencial é mínimo, também chamado de raio efetivo ( $R$ ).

$$R = \left( \frac{a_1}{a_2} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (3.19)$$

A largura efetiva do anel é dada em termos da energia de Fermi  $E_f$  calculando os

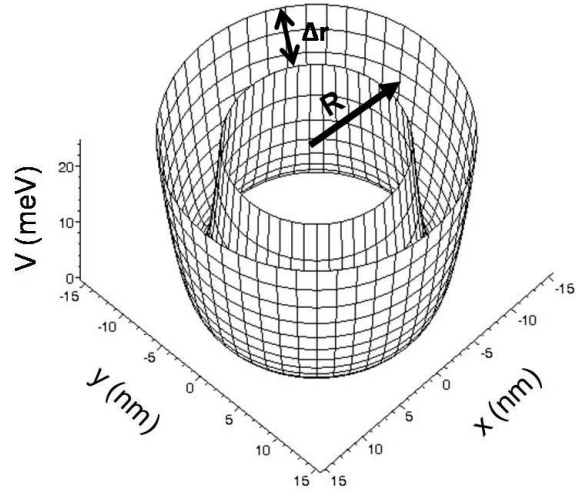


Figura 3.3: Potencial de confinamento lateral  $V(x,y)$  que simula o confinamento anelar.

valores  $r_+$  e  $r_-$  onde  $V(r) = E_f$ .

$$\Delta r = r_+ - r_- \quad r_{\pm} = \left( \frac{V_0 + E_f \pm \sqrt{2E_f V_0 + E_f^2}}{2a_2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.20)$$

onde  $r_+$  é o raio efetivo externo e  $r_-$  o raio efetivo interno do anel.

Para baixas energias de Fermi, teremos

$$r_{\pm} = \left( \frac{V_0 + E_f \pm (E_f + V_0)}{2a_2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.21)$$

assim

$$r_+ = \left( \frac{2V_0 + 2E_f}{2a_2} \right)^{\frac{1}{2}} = \left( \frac{V_0 + E_f}{a_2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{e} \quad r_- = 0. \quad (3.22)$$

Das equações (3.20,3.22) e  $w_0^2 = 8a_2/\mu$  [53]

$$\Delta r = \left( \frac{8(V_0 + E_f)}{w_0^2 \mu} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{largura do anel}). \quad (3.23)$$

Considerando ainda ( $E_f \ll V_0$ ), a largura do anel pode ser dada por:

$$\Delta r = \left( \frac{8E_f}{w_0^2 \mu} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.24)$$

ou

$$\Delta r = \left( \frac{E_f}{a_2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.25)$$

### 3.2.1 O Elétron em um Anel Quântico Tridimensional

Nesta seção, resolveremos, analiticamente, o espectro de energia e as funções de onda para o anel bidimensional no plano  $r$ - $\varphi$ , e em seguida resolveremos a parte ao longo da direção  $z$ .

Para a parte bidimensional, aplicamos  $\Lambda(r, \varphi)$  no Hamiltoniano (3.17):

$$\hat{H}_{r\varphi}\Lambda = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{ieBr^2}{2c\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{e^2 B^2 r^4}{4c^2 \hbar^2} \right) \right] \Lambda + V_{r\varphi}\Lambda \quad (3.26)$$

chamamos  $\lambda_c^2 = c\hbar/eB$  e  $E_0 = \hbar^2/2\mu$

$$\hat{H}_{r\varphi}\Lambda = E_0 \left[ -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{ir^2}{2\lambda_c^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{r^4}{4\lambda_c^4} \right) \right] \Lambda + V_{r\varphi}\Lambda \quad (3.27)$$

dividindo ambos os lados por  $E_0$  e fazendo as seguintes substituições  $\hat{H}_{r\varphi}/E_0 \rightarrow \tilde{H}_{r\varphi}$  e  $V_{r\varphi}/E_0 \rightarrow \tilde{V}_{r\varphi}$ , ficamos com:

$$\tilde{H}_{r\varphi}\Lambda = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) \Lambda - \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{ir^2}{2\lambda_c^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{r^4}{4\lambda_c^4} \right) \Lambda + \tilde{V}_{r\varphi}\Lambda. \quad (3.28)$$

Afim de separarmos a parte radial da parte angular, propomos a seguinte solução:

$$\Lambda(r, \varphi) = e^{-im\varphi}\Theta(r) \quad (3.29)$$

o que resulta em uma equação que depende somente da parte radial, dada pela equação (3.30)

$$\tilde{H}_{r\varphi}\Theta = -\frac{\partial^2\Theta}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial\Theta}{\partial r} + \frac{m^2}{r^2}\Theta - \frac{m}{2\lambda_c^2}\Theta + \frac{r^2}{4\lambda_c^4}\Theta + \tilde{V}_{r\varphi}\Theta, \quad (3.30)$$

substituindo na equação de Schrodinger  $(\tilde{E} - \tilde{H})\Theta(r) = 0$  e levando em conta a equação (3.18), obtemos

$$\frac{\partial^2\Theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial\Theta}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \left( m^2 + \frac{a_1}{E_0} \right) \Theta - \left( \frac{1}{4\lambda_c^4} + \frac{a_2}{E_0} \right) r^2\Theta + \left( \tilde{E} + \frac{m}{2\lambda_c^2} + \tilde{V}_0 \right) \Theta = 0 \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial^2\Theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial\Theta}{\partial r} + \left[ \frac{-\eta}{r^2} - \beta r^2 + \gamma \right] \Theta = 0 \quad (3.32)$$

onde

$$\eta = m^2 + \frac{a_1}{E_0} \quad (3.33)$$

$$\beta = \frac{1}{\lambda_c^4} + \frac{a_2}{E_0} \quad (3.34)$$

$$\gamma = \tilde{E} + \frac{m}{2\lambda_c} + \tilde{V}_0. \quad (3.35)$$

Afim de tornar a equação com uma forma cuja solução seja conhecida, faremos algumas manipulações algébricas. Introduziremos  $\xi = \frac{1}{2} \left(\frac{r}{\lambda}\right)^2$  na equação (3.32), ficando com uma equação em termos da variável adimensional  $\xi$ :

$$\xi \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} + \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} + \left[ \frac{\gamma \lambda^2}{2} - \lambda^4 \beta \xi - \frac{\eta}{4\xi} \right] \Theta = 0, \quad (3.36)$$

para esta equação, propomos a solução  $\Theta(r) = \xi^s e^{-\xi/2} f$ , o que nos dá:

$$\xi f'' + (2s + 1 - \xi) f' + \left[ \left( \frac{1}{4} - \lambda^4 \beta \right) \xi + \left( s^2 - \frac{\eta}{4} \right) \frac{1}{\xi} + \frac{\gamma \lambda^2}{2} - \frac{1}{2} - s \right] f = 0. \quad (3.37)$$

Como conhecemos a solução da equação:

$$\xi \omega'' + (M + 1 - \xi) \omega' + n \omega = 0 \quad (3.38)$$

dada pela função hipergeométrica confluyente [54]

$$\omega = F_1(-n, M + 1, \xi) \quad (3.39)$$

podemos compará-la com a equação (3.37) para obter sua solução, onde  $w_0 = \sqrt{8a_2/\mu}$  caracteriza o confinamento transversal,  $w_c = eB/(\mu c)$  é a frequência ciclotrônica,  $w = \sqrt{w_c^2 + w_o^2}$  a frequência ciclotrônica efetiva,  $\lambda = \sqrt{\hbar c/\mu w}$  o comprimento magnético efetivo e  $M = \sqrt{m^2 + \frac{2a_1\mu}{\hbar^2}}$  o que resulta em  $(\frac{1}{4} - \lambda^4 \beta)$  e  $(s^2 - \frac{\eta}{4})$  nulos,  $n = \frac{\gamma \lambda^2}{2} - \frac{1}{2} - s$  e  $M = 2s$ . Portanto:

$$f = F_1\left(-n, 2s + 1, \frac{1}{2} \left(\frac{r}{\lambda}\right)^2\right). \quad (3.40)$$

Fazendo as devidas substituições e normalizando a função obtida, obtêm-se:

$$\Lambda_{n,m}(r, \varphi) = \frac{1}{\lambda} \left( \frac{\Gamma[n + M + 1]}{2^{M+1} n! (\Gamma[M + 1])^2 \pi} \right)^2 \left(\frac{r}{\lambda}\right)^M e^{-im\varphi} e^{-\frac{1}{4} \left(\frac{r}{\lambda}\right)^2} F_1(-n, M + 1, \frac{1}{2} (r/\lambda)^2) \quad (3.41)$$

As autoenergias, são obtidas a partir da expressão para  $n$  que depende implicitamente de  $\tilde{E}$  através de  $\gamma$ . Como  $\tilde{E} = E/E_0$ :

$$E_{n,m} = \left( n + \frac{1}{2} + \frac{M}{2} \right) \hbar w - \frac{m}{4} \hbar w_c - \frac{\mu}{4} w_0^2 r_0^2. \quad (3.42)$$

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad e \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Para que o problema tridimensional esteja completo, devemos resolver também as equações da componente do movimento ao longo de  $z$ , com função de onda  $F_l(z)$ . Neste caso assumimos a solução do poço quântico de barreiras infinitas. A função de onda final resultará



do produto de  $F_l(z)$  pela função de onda bidimensional  $\Lambda_{n,m}(r, \varphi)$  e a energia total será a soma da energia em  $z$ ,  $E_l$ , e da energia  $E_{n,m}$  dada pela equação 3.42.

As autofunções do poço quântico são dadas pela equação [55]:

$$F_l(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{l\pi z}{L} + \frac{l\pi}{2}\right). \quad (3.43)$$

$$l = 1, 2, 3, \dots$$

$$(3.44)$$

e as autoenergias  $E_l$ ,

$$E_l = \left(\frac{l^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu L^2}\right). \quad (3.45)$$

Agora que temos as funções de onda,  $\Lambda(r, \varphi)$  e  $F_l(z)$ , e as autoenergias  $E_{n,m}$  e  $E_l$ , podemos escrever a função de onda  $\Phi_{n,m,l}(r, \varphi, z)$  e as autoenergias  $E_{n,m,l}$  tridimensionais, dadas pelas Eqs. (3.46,3.47)

$$\begin{aligned} \Psi_{n,m,l}(r, \varphi, z) &= \Lambda(r, \varphi)F_l(z) = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\Gamma[n+M+1]}{2^{M+1}n!(\Gamma[M+1])^2\pi}\right)^2 F_l(z) \\ &\times \left(\frac{r}{\lambda}\right)^M e^{-im\varphi} e^{-\frac{1}{4}\left(\frac{r}{\lambda}\right)^2} F_1\left(-n, M+1, \frac{1}{2}\left(\frac{r}{\lambda}\right)^2\right) \end{aligned} \quad (3.46)$$

e

$$E_{n,m,l} = E_{n,m} + E_l = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{M}{2}\right) \hbar\omega - \frac{m}{4} \hbar\omega_c - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2 + \left(\frac{l^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu L^2}\right). \quad (3.47)$$

$n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ,  $m = \dots, -1, 0, 1, \dots$  e  $l = 1, 2, 3, \dots$ . Os números quânticos  $n$ ,  $m$  e  $l$  caracterizam o movimento radial, o momento angular e a quantização ao longo de  $z$ , respectivamente. Comparando os resultados dos cálculos acima para o caso bidimensional com a expressão final para  $E_{n,m}$  apresentada por Tan em [53], podemos destacar que o erro cometido por Tan, diferentemente do que foi apresentado neste trabalho, está no termo que varia com  $\omega_c$ , o qual deveria ser multiplicado por  $1/2$ .

### 3.2.2 Resultados do Anel Tridimensional

As energias do estado fundamental de um anel tridimensional em função do campo para anéis de diferentes dimensões estão ilustradas nas Figs. (3.4 e 3.5), onde pode-se observar que, assim como no caso unidimensional, há deslocamentos nos níveis de energia para cada valor de  $m$ . Neste modelo, tanto para no anel de raio  $R = 11.6 \text{ nm}$  (figura

3.4) quanto no anel de raio  $R = 22.5 \text{ nm}$  (figura 3.5), quanto menor a largura do anel, mais próximo ele será do modelo unidimensional, apresentado no **Caso B**, onde as linhas pretas tem seus mínimos bem próximos ao valor zero da energia. Já no **Caso A**, onde a largura do anel é maior, ocorrem deslocamento dos espectros para energias maiores. Isto deve-se aos efeitos causados pela penetração do campo magnético, causando efeitos mais evidentes em anéis mais largos.

Contrastando como o caso unidimensional, o aumento da intensidade do campo magnético no anel tridimensional também contribui para o aumento do confinamento efetivo do elétron deslocando as energias para valores maiores. O comportamento periódico com o fluxo magnético fica assim destruído, porém oscilações do caráter do estado entre valores consecutivos do momento angular  $m$  ainda são aparentes. Outro aspecto importante a ser observado é o fato dos cruzamentos dos níveis de energia ocorrerem em valores de campos magnéticos diferentes para larguras diferentes, o que não podia ser observado no caso unidimensional.

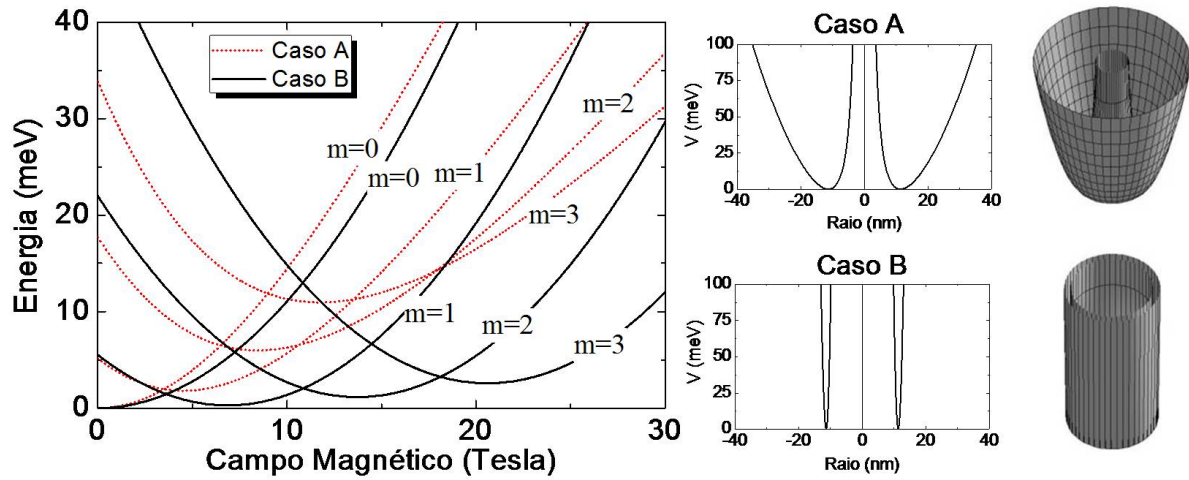


Figura 3.4: Estados de energia do anel tridimensional em função do campo magnético para  $R=11.6 \text{ nm}$  e duas larguras diferentes.

Na Fig. (3.6) podemos ver os orbitais construídos a partir da função de onda da Eq. (3.46) eles consistem em superfícies em três dimensões representando as probabilidades de encontrar o elétron no anel para diferentes valores de  $n$  e  $l$  que satisfazem a equação,  $|\Psi_{n,m,l}(r, \varphi, z)|^2 = cte$ . Estas figuras correspondem às interseções de  $|\Psi(r, 0, 0)|^2 = cte$  demarcados pelas linhas vermelhas em cada gráfico em duas dimensões ilustradas nos painéis inferiores. Nesta figura, o número de camadas circulares inscritas umas nas outras está diretamente ligada ao valor de  $n$ , já o número de camadas verticais está ligado ao valor

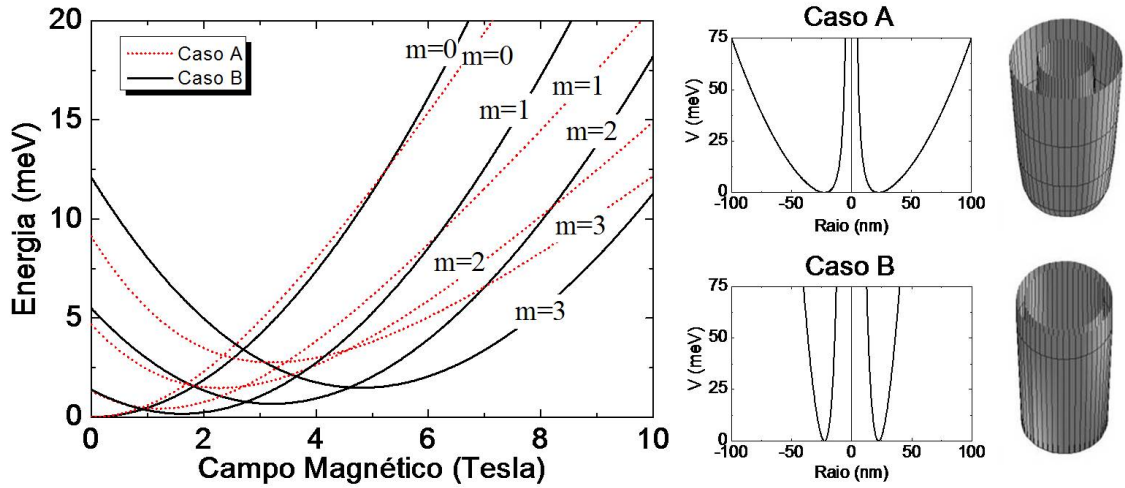


Figura 3.5: Estados de energia do anel tridimensional em função do campo magnético para  $R=22.5$  nm e duas larguras diferentes.

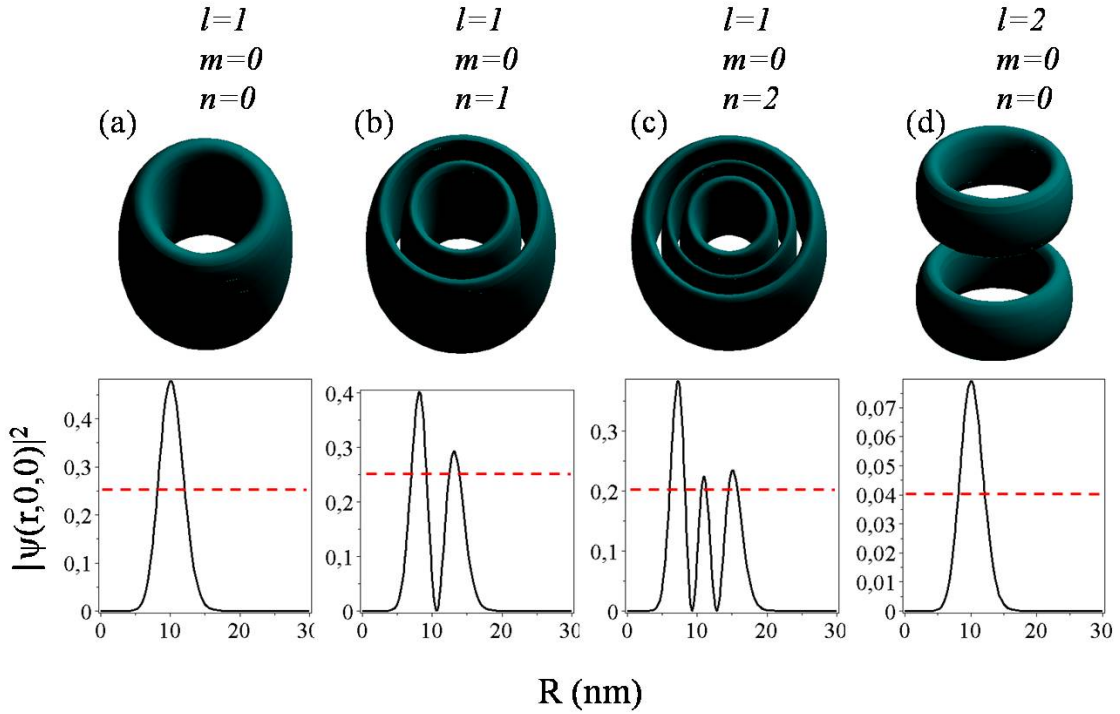


Figura 3.6: (a), (b), (c) e (d) Orbitais representando as superfícies de igual probabilidade de encontrar o elétron no anel para diferentes valores de  $n$  e  $l$  segundo  $|\Psi_{n,m,l}(r, \varphi, z)|^2 = cte$ , painéis superiores. Painéis inferiores, representação da função  $|\Psi(r, 0, 0)|^2$ , e as intercepções  $|\Psi(r, 0, 0)|^2 = cte$ , com excessão do (d), onde foi usado  $z = 0.01$ , pois em  $z = 0$  a função é nula.

de  $l$ . Como o valor de  $m$  não interfere na forma desses orbitais, não foram construídas figuras para diferentes valores desta variável.

# Capítulo 4

## BANDA DE VALÊNCIA

O cálculo da estrutura eletrônica na banda de valência irá além da aproximação parabólica. Usando o mesmo tipo de confinamento recém abordado para a banda de condução, aplicaremos o modelo de Luttinger para caracterizar os estados confinados num anel de *InAs*.

Como a parte radial da função de onda completa não possui solução analítica, nos resta como alternativa a programação numérica, onde optamos por minimizar o esforço computacional calculando analiticamente a parte em  $\varphi$ , o que reduz consideravelmente o tempo computacional. Também faremos uso da base recém exposta no capítulo anterior, na equação (3.46). Apresentaremos primeiramente os elementos de matriz do Hamiltoniano de Luttinger 4 x 4 em coordenadas cilíndricas obtendo expressões que não dependerão mais de  $\varphi$ , mas de  $r$  e  $z$ , e construiremos uma matriz na base (3.46), onde teremos a variação de dois números quânticos  $n$  e  $l$  apenas, já que o número quântico  $m$  será introduzido através das regras de seleção obtidas durante a solução analítica da parte angular. A matriz construída é uma matriz 24 x 24, onde  $n$  toma valores 0, 1 e 2, e  $l$  valores 1 e 2.

### 4.1 O Hamiltoniano em Coordenadas Cilíndricas e o Cálculo dos Elementos de Matriz

Nesta seção apresentamos os elementos de matriz do Hamiltoniano  $H_K$ .

Usando as equações (2.31,2.32,2.33,2.34), obtêm-se:

$$a_+^{hh\dagger} = \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + \gamma_2) \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{im_0\omega_e}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right]$$

$$+ \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{3\hbar\omega_e}{2} \left( \kappa + \frac{9}{4}q \right) \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} a_-^{lh\uparrow} &= \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - \gamma_2) \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{im_0\omega_e}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right] \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar\omega_e}{2} \left( \kappa + \frac{1}{4}q \right) \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} d_+^{hh\downarrow} &= \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + \gamma_2) \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{im_0\omega_e}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right] \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{3\hbar\omega_e}{2} \left( \kappa + \frac{9}{4}q \right) \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} d_-^{lh\downarrow} &= \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - \gamma_2) \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{im_0\omega_e}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right] \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\hbar\omega_e}{2} \left( \kappa + \frac{1}{4}q \right) \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$b_+ = -\frac{\hbar^2\sqrt{3}}{4m_0}\gamma_3 e^{i\varphi} \left( \frac{\partial^2}{\partial z\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial^2}{\partial z\partial\varphi} \right) \quad (4.5)$$

$$b_- = -\frac{\hbar^2\sqrt{3}}{4m_0}\gamma_3 e^{-i\varphi} \left( \frac{\partial^2}{\partial z\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial^2}{\partial z\partial\varphi} \right) \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} c_+ &= \frac{\hbar^2\sqrt{3}}{4m_0}(\gamma_2 + \gamma_3) e^{2i\varphi} \left[ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{m_0\omega_e r}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial r} \right. \\ &+ \left. \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + 2i \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \frac{im_0\omega_e}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{2i}{r} \frac{\partial^2}{\partial r\partial\varphi} - \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right] \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} c_- &= \frac{\hbar^2\sqrt{3}}{4m_0}(\gamma_2 + \gamma_3) e^{-2i\varphi} \left[ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m_0\omega_e r}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial r} \right. \\ &+ \left. \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - 2i \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \frac{im_0\omega_e}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{2i}{r} \frac{\partial^2}{\partial r\partial\varphi} - \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Agora que possuímos as componentes  $a_{\pm}$ ,  $b_{\pm}$ ,  $c_{\pm}$  e  $d_{\pm}$ , vamos aplicar o Hamiltoniano na parte angular da equação (3.46), dada pela expressão  $e^{-im\varphi}$ , para eliminarmos a dependência explícita com esta variável. Com isso, obtemos as regras de seleção para os valores de  $m$ , o que reduz o Hamiltoniano a:

$$H(m) = \begin{pmatrix} \langle m_1 | a_+^{hh\uparrow} | m_1 \rangle & \langle m_1 | b_- | m_2 \rangle & \langle m_1 | c_- | m_3 \rangle & 0 \\ \langle m_2 | b_+ | m_1 \rangle & \langle m_2 | a_-^{lh\uparrow} | m_2 \rangle & 0 & \langle m_2 | c_- | m_4 \rangle \\ \langle m_3 | c_+ | m_1 \rangle & 0 & \langle m_3 | d_-^{lh\downarrow} | m_3 \rangle & \langle m_3 | b_- | m_4 \rangle \\ 0 & \langle m_4 | c_+ | m_2 \rangle & \langle m_4 | b_+ | m_3 \rangle & \langle m_4 | d_+^{hh\downarrow} | m_4 \rangle \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

onde

$$\begin{aligned}\langle m_1|a_+^{hh\uparrow}|m_1\rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + \gamma_2) \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} + \frac{mm_0\omega_e}{2\hbar} - \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right] \\ &+ \frac{2\pi\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2\pi \frac{3\hbar\omega_e}{2} \left( \kappa + \frac{9}{4}q \right)\end{aligned}\quad (4.10)$$

$$\begin{aligned}\langle m_2|a_-^{hh\uparrow}|m_2\rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - \gamma_2) \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(m-1)^2}{r^2} + \frac{(m-1)m_0\omega_e}{2\hbar} \right. \\ &- \left. \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right] + \frac{2\pi\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2\pi \frac{\hbar\omega_e}{2} \left( \kappa + \frac{1}{4}q \right)\end{aligned}\quad (4.11)$$

$$\begin{aligned}\langle m_4|d_+^{hh\downarrow}|m_4\rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + \gamma_2) \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(m-3)^2}{r^2} + \frac{(m-3)m_0\omega_e}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right. \\ &- \left. \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right] + \frac{2\pi\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2\pi \frac{3\hbar\omega_e}{2} \left( \kappa + \frac{9}{4}q \right)\end{aligned}\quad (4.12)$$

$$\begin{aligned}\langle m_3|d_-^{hh\downarrow}|m_3\rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - \gamma_2) \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(m-2)^2}{r^2} + \frac{(m-2)m_0\omega_e}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right. \\ &- \left. \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right] + \frac{2\pi\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2\pi \frac{\hbar\omega_e}{2} \left( \kappa + \frac{1}{4}q \right)\end{aligned}\quad (4.13)$$

$$\langle m_1|b_-|m_2\rangle = -2\pi \frac{\hbar^2\sqrt{3}\gamma_3}{4m_0} \left[ \frac{\partial^2}{\partial z\partial r} - \frac{(m-1)}{r} \frac{\partial}{\partial z} \right]\quad (4.14)$$

$$\begin{aligned}\langle m_1|c_-|m_3\rangle &= 2\pi \frac{\hbar^2\sqrt{3}}{4m_0}(\gamma_2 + \gamma_3) \left[ -\frac{\partial^2}{\partial^2 r} + \frac{(2m-3) - \frac{m_0\omega_e r^2}{2\hbar}}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}(m^2 - 2m) \right. \\ &+ \left. \frac{m_0\omega_e(m-2)}{2\hbar} - \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right]\end{aligned}\quad (4.15)$$

$$\langle m_2|b_+|m_1\rangle = -2\pi \frac{\hbar^2\sqrt{3}\gamma_3}{4m_0} \left[ \frac{\partial^2}{\partial z\partial r} + \frac{(m)}{r} \frac{\partial}{\partial z} \right]\quad (4.16)$$

$$\begin{aligned}\langle m_2|c_-|m_4\rangle &= 2\pi \frac{\hbar^2\sqrt{3}}{4m_0}(\gamma_2 + \gamma_3) \left[ -\frac{\partial^2}{\partial^2 r} + \frac{(2m-5) - \frac{m_0\omega_e r^2}{2\hbar}}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}(m^2 - 4m + 3) \right. \\ &+ \left. \frac{m_0\omega_e(m-3)}{2\hbar} - \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right]\end{aligned}\quad (4.17)$$

$$\begin{aligned}\langle m_3|c_+|m_1\rangle &= 2\pi \frac{\hbar^2\sqrt{3}}{4m_0}(\gamma_2 + \gamma_3) \left[ -\frac{\partial^2}{\partial^2 r} + \frac{(1-2m) + \frac{m_0\omega_e r^2}{2\hbar}}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}(m^2 - 2m) \right. \\ &+ \left. \frac{m_0\omega_e m}{2\hbar} - \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right]\end{aligned}\quad (4.18)$$

$$\langle m_3|b_-|m_4\rangle = -2\pi \frac{\hbar^2\sqrt{3}\gamma_3}{4m_0} \left[ \frac{\partial^2}{\partial z\partial r} + \frac{(m-3)}{r} \frac{\partial}{\partial z} \right] \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \langle m_4|c_+|m_2\rangle &= 2\pi \frac{\hbar^2\sqrt{3}}{4m_0} (\gamma_2 + \gamma_3) \left[ -\frac{\partial^2}{\partial^2 r} + \frac{(3-2m) + \frac{m_0\omega_e r^2}{2\hbar}}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} (m^2 - 4m + 3) \right. \\ &+ \left. \frac{m_0\omega_e(m-1)}{2\hbar} - \frac{m_0^2\omega_e^2 r^2}{4\hbar^2} \right] \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\langle m_4|b_+|m_3\rangle = -2\pi \frac{\hbar^2\sqrt{3}\gamma_3}{4m_0} \left[ \frac{\partial^2}{\partial z\partial r} + \frac{(m-2)}{r} \frac{\partial}{\partial z} \right] \quad (4.21)$$

Agora que temos os termos do Hamiltoniano 4 x 4 sem a dependência em  $\varphi$ , acrescentaremos as contribuições do potencial  $V(r)$  e do *strain* ao Hamiltoniano, como foi explicado no capítulo 2, o que nos dá

$$\begin{aligned} H(m) &= \begin{pmatrix} \langle m_1|a_+^{hh\uparrow}|m_1\rangle & \langle m_1|b_-|m_2\rangle & \langle m_1|c_-|m_3\rangle & 0 \\ \langle m_2|b_+|m_1\rangle & \langle m_2|a_-^{lh\uparrow}|m_2\rangle & 0 & \langle m_2|c_-|m_4\rangle \\ \langle m_3|c_+|m_1\rangle & 0 & \langle m_3|d_-^{lh\downarrow}|m_3\rangle & \langle m_3|b_-|m_4\rangle \\ 0 & \langle m_4|c_+|m_2\rangle & \langle m_4|b_+|m_3\rangle & \langle m_4|d_+^{hh\downarrow}|m_4\rangle \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} V(r) + \Delta E_{hh} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V(r) + \Delta E_{lh} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V(r) + \Delta E_{lh} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V(r) + \Delta E_{hh} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.22)$$

A matriz 24 x 24 é obtida, aplicando a Eq.(4.22) na função de onda (3.46) sem a exponencial da parte angular. Isso nos permite calcular as autoenergias em função de vários parâmetros, como: raio, largura e campo magnético, apresentado na seção seguinte.

## 4.2 Resultados

Nesta seção apresentaremos os resultados numéricos da estrutura eletrônica da banda de valência obtidos através da simulação computacional, onde foram calculadas as autoenergias em função do raio, da largura efetiva do anel. Ilustraremos dois casos: anéis na ausência e na presença de campo magnético externo.

A partir dos resultados do *gap* de energia entre as bandas de condução e valência (figura 4.1), obtidos experimentalmente por Teodoro [13], foi feita uma análise do potencial

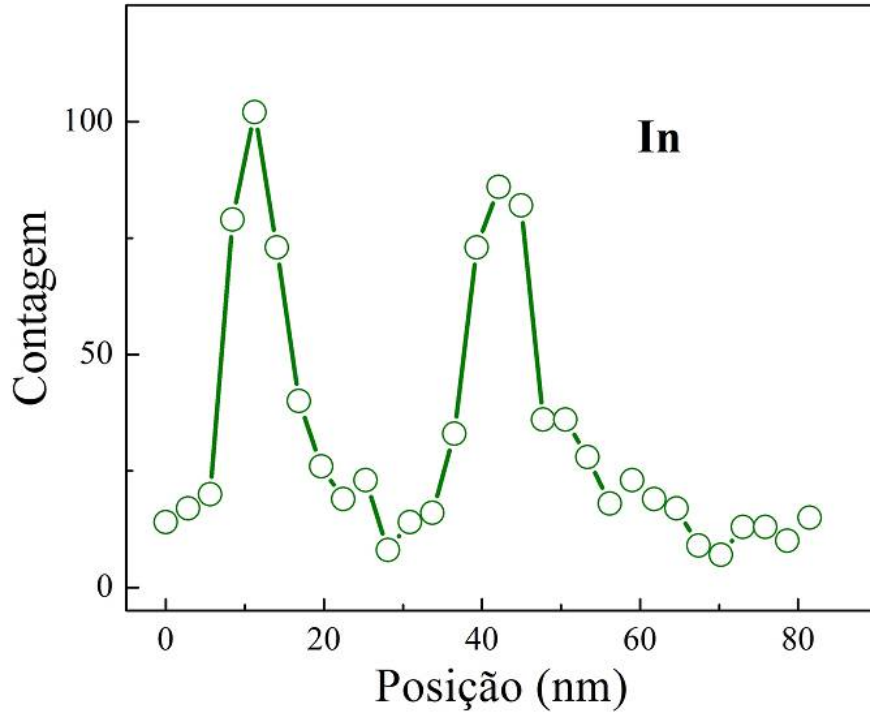


Figura 4.1: Medidas de dispersão de energia por raios-X ao longo do plano de um único anel utilizando um microscópio de transmissão [13].

$V(r)$  [53], com o intuito de ajustar os parâmetros  $a_1$  e  $a_2$  da Eq. (3.18) definindo um anel com dimensões (raio e largura) equivalente às de um anel real.

A partir do valor de concentração de  $In$ , reportado na Fig. (2.5), usado para calibrar o máximo da Fig. (4.1), obtivemos a Fig.(4.2), que mostra o ajuste do potencial do anel sobre o  $gap$  de energia, a curva em vermelho foi obtida a partir da Eq. (2.1), onde foi obtido um raio  $R = 14.0 \text{ nm}$  e uma largura  $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$ . Usando os valores de  $a_1$  e  $a_2$  obtidos, foi calculada numericamente a estrutura eletrônica das bandas de buracos leve e pesado. Nas discussões seguintes usaremos a notação  $(hh \text{ ou } lh)|m, n, l\rangle$  para classificar os estados de energia das bandas de buraco pesado ( $hh$ ) ou buraco leve ( $lh$ ), com os números quânticos  $m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$ ,  $n = 0, 1, 2$  e  $l = 1, 2$ .

As Figs. (4.3 e 4.4) ilustram as autoenergias em função da largura do anel sem  $strain$  ( $\varepsilon_{\parallel} = 0$ ), e com  $strain$  ( $\varepsilon_{\parallel} = 1.37\%$ ), calculadas para um raio de  $R = 14.0 \text{ nm}$ . Podemos observar que na medida em que a largura efetiva do anel aumenta os níveis são deslocados para valores de energia maiores, esperado quando o confinamento enfraquece. É importante destacar o efeito relativo do  $strain$  que desloca efetivamente os níveis de  $hh$  e  $lh$  uns em relação aos outros. Porém, a partir desses gráficos energéticos é difícil elucidar os efeitos reais de hibridização (acoplamento) entre as duas subbandas. Dada sua



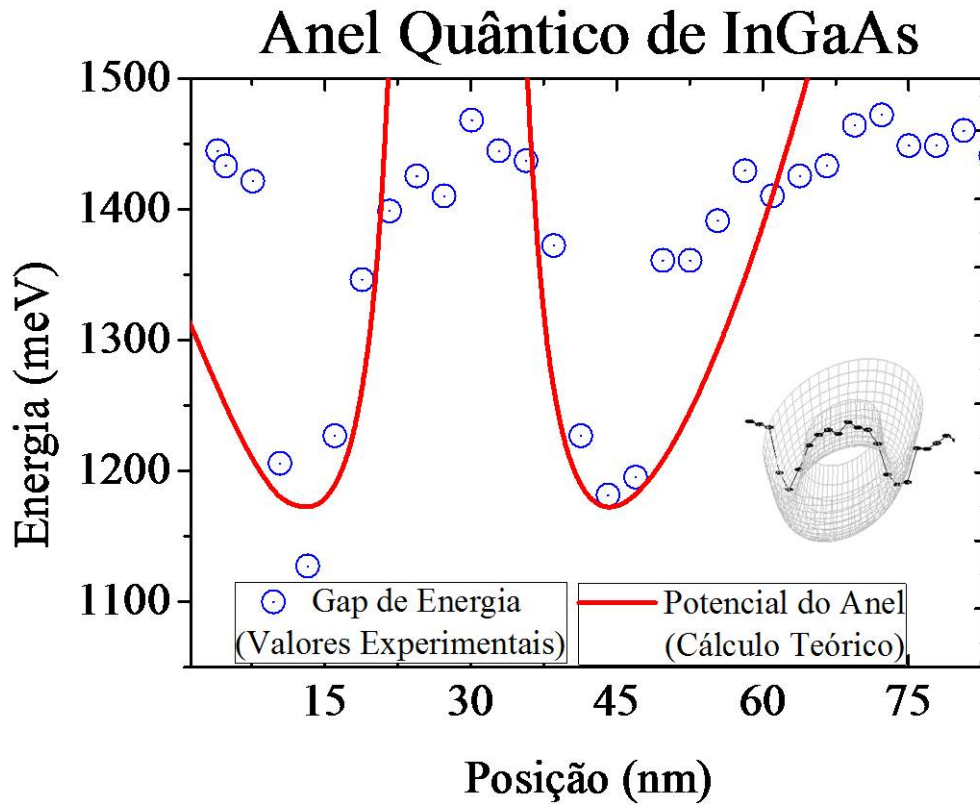


Figura 4.2: Os símbolos representam os valores de  $E_g$  em função da posição em um corte transversal do QR obtido pelo uso da Fig. 4.1 e a curva sólida um corte do potencial teórico. O *inset* mostra o perfil 3D do potencial teórico usado para modelar o confinamento do QR com os valores  $E_g$ .

importância nas propriedades ópticas analisaremos estes efeitos no estado fundamental da banda de valência.

Através do cálculo dos coeficientes da expansão da função de onda, podemos identificar o caráter predominante dos estados. Na Fig. 4.5 estão representados os coeficientes de expansão da função de onda do estado fundamental da banda de valência que caracterizam o caráter deste. As linhas verdes representam os coeficientes em um anel não-tensionado. As linhas azuis da Fig. 4.5 representam os coeficientes em um anel tensionado. O caráter do estado fundamental para o anel tensionado tem um alto grau de pureza. Já o anel sem tensão manifesta mudanças drásticas no caráter do estado fundamental quando variamos sua largura efetiva. Essas mudanças, mostram que o caráter dominante pode variar entre  $lh$  no topo da banda de valência para anéis estreitos ou  $hh$  para larguras efetivas maiores do que  $2.1\text{ nm}$ , o que não ocorre quando o anel está sob o efeito do *strain*, onde o caráter dominante é sempre  $hh$ .

A partir das Figs. (4.6 e 4.7) onde temos as autoenergias em  $meV$  em função do

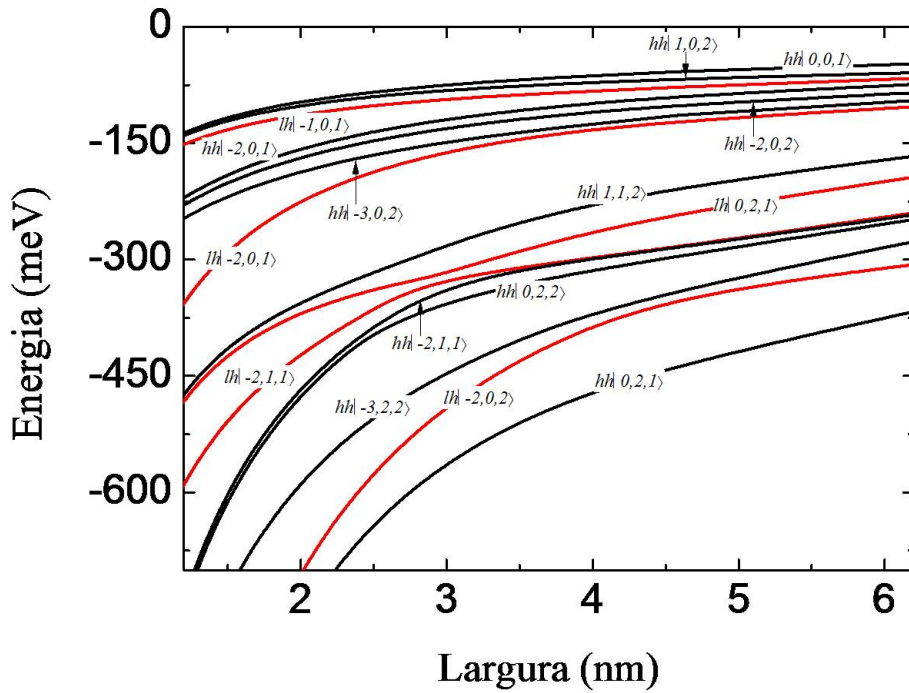


Figura 4.3: Níveis de energia da banda de valência em função da largura efetiva do anel para um raio  $R = 14.0$  nm e altura  $L = 5$  nm, calculados sem *strain* no plano,  $\varepsilon_{\parallel} = 0$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados.

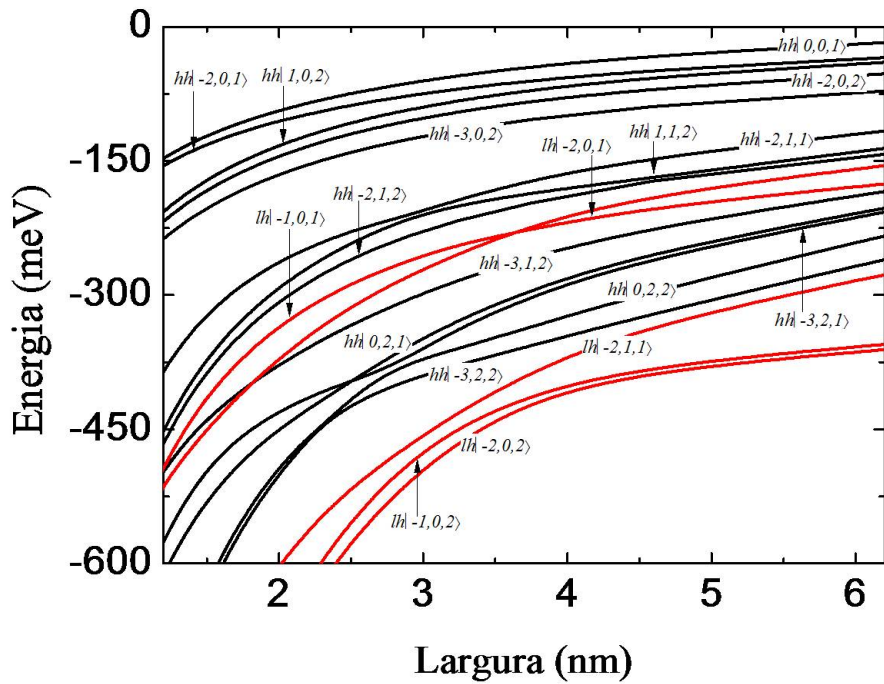


Figura 4.4: Níveis de energia da banda de valência em função da largura efetiva do anel para um raio  $R = 14.0$  nm e altura  $L = 5$  nm, calculado com *strain* no plano  $\varepsilon_{\parallel} = 1.37\%$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados.

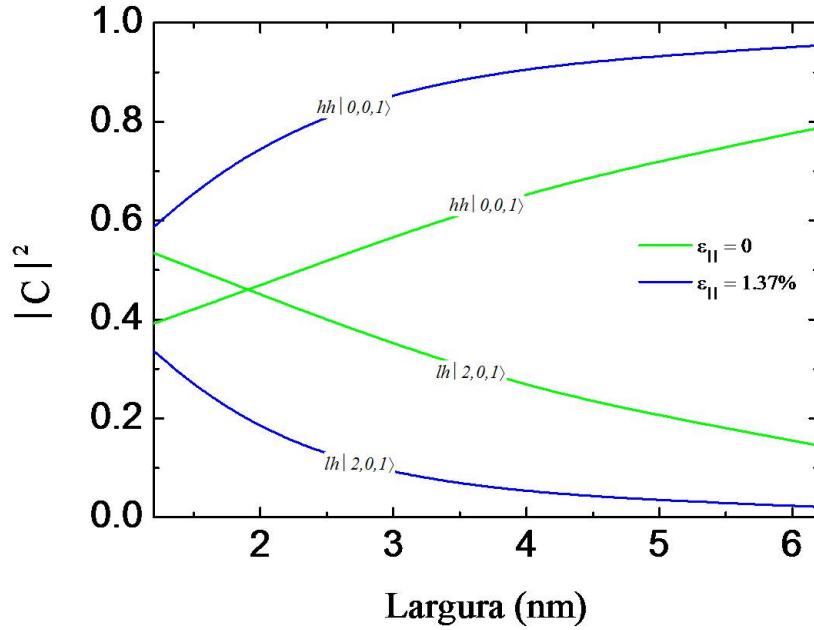


Figura 4.5: Coeficientes da expansão da função de onda do estado fundamental da banda de valência em função da largura efetiva para um raio  $R = 14.0 \text{ nm}$  calculado com e sem strain.

raio sem *strain* ( $\varepsilon_{||} = 0$ ) e com *strain* ( $\varepsilon_{||} = 1.37\%$ ), calculadas para uma largura  $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$ , podemos extrair as mesmas conclusões discutidas sobre as Figs. (4.3 e 4.4).

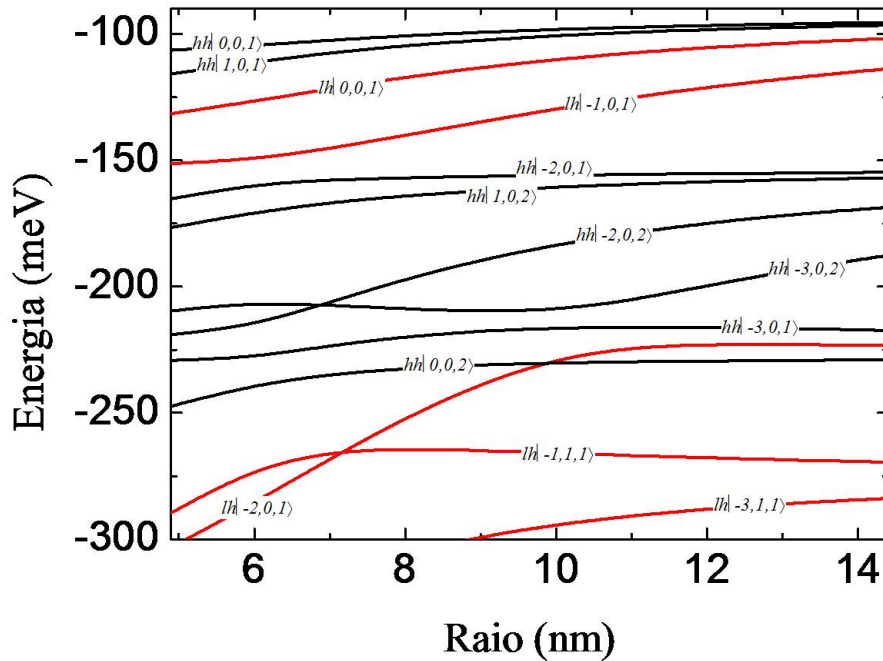


Figura 4.6: Níveis de energia da banda de valência em função do raio efetivo do anel para uma largura  $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$ , calculada sem *strain* no plano,  $\varepsilon_{||} = 0$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados.

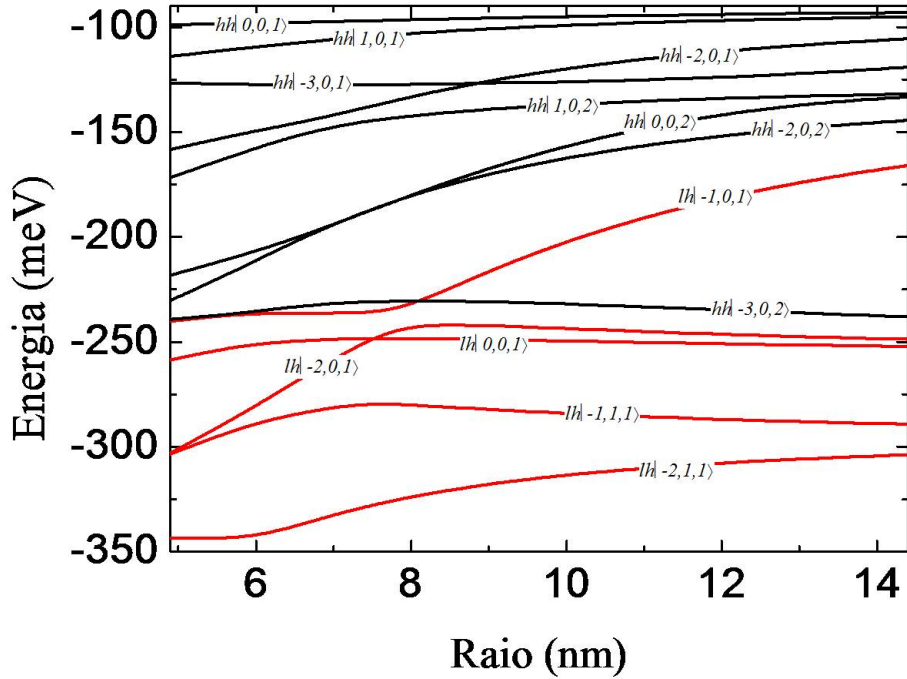


Figura 4.7: Níveis de energia da banda de valência em função do raio efetivo do anel para uma largura  $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$ , calculada com um *strain* no plano  $\varepsilon_{\parallel} = 1.37\%$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados.

Como as Figs. (4.6 e 4.7) foram construídas para um valor de largura efetiva ( $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$ ) que corresponde a um caráter dominante *hh* para o estado fundamental, mostrado na Fig. (4.5), a Fig. (4.8) nos permite afirmar que, para valores de raio entre 5 e 14 *nm*, o caráter do estado fundamental do anel não depende fortemente do raio, já que nesse intervalo o caráter dominante é sempre *hh*.

Para os resultados de autoenergias em função do campo magnético aplicado, sem *strain* ( $\varepsilon_{\parallel} = 0$ ), e com *strain* ( $\varepsilon_{\parallel} = 1.37\%$ ) (figuras 4.9 e 4.10), e do caráter do estado fundamental (figura 4.11), a notação usada na classificação dos estados sofreu uma modificação, agora passa a ter os símbolos ( $\uparrow$ ) e ( $\downarrow$ ) que correspondem aos estados de *spin* para cima ou para baixo, respectivamente.

Para simular potenciais condições experimentais foram usados campos magnéticos de até 20 *T*. Para isso foram simulados os estados sem (figura 4.9) e com *strain* (figura 4.10) em função de campos magnéticos. Pode-se observar a degenerescência dos estados em  $B = 0$ , além do deslocamento dos topos dos níveis ao longo do campo magnético devido à variação do número quântico  $m$ , porém, a interação entre os níveis faz com que esses topos também tenham um deslocamento vertical, que pode ser visto, principalmente, nos

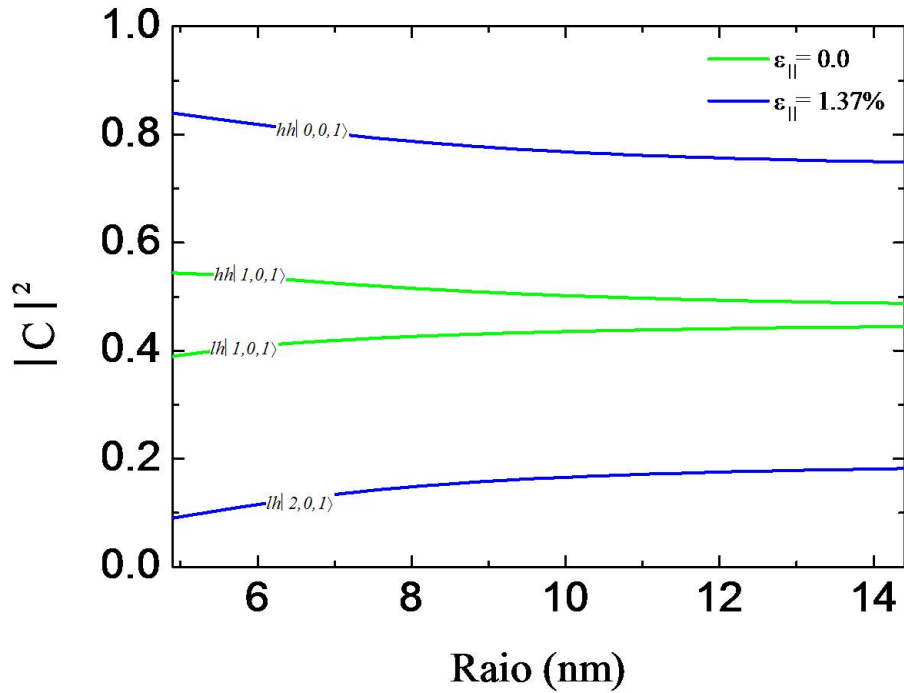


Figura 4.8: Coeficientes da expansão da função de onda do estado fundamental da banda de valência em função do raio efetivo para uma largura  $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$  calculado com e sem strain.

níveis  $hh| \uparrow, -1, 0, 2\rangle$ ,  $hh| \downarrow, -1, 0, 2\rangle$ ,  $hh| \uparrow, 0, 0, 2\rangle$  e  $hh| \downarrow, 0, 0, 2\rangle$ , que são deslocados para cima e nos níveis  $lh| \uparrow, 0, 0, 1\rangle$ ,  $lh| \downarrow, 0, 0, 1\rangle$ ,  $lh| \uparrow, 1, 0, 1\rangle$  e  $lh| \downarrow, 1, 0, 1\rangle$ , que são deslocados para baixo (*inset* das figuras 4.9 e 4.10).

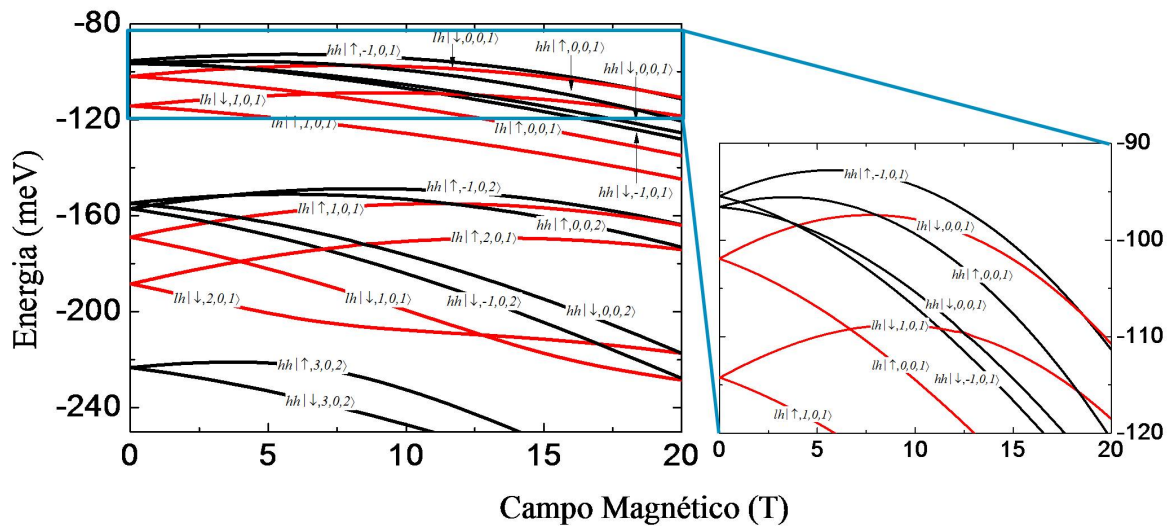


Figura 4.9: Níveis de energia da banda de valência em função do campo magnético aplicado no anel para uma largura  $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$  e um raio de  $R = 14.0 \text{ nm}$ , calculada sem *strain* no plano,  $\varepsilon_{||} = 0$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados.

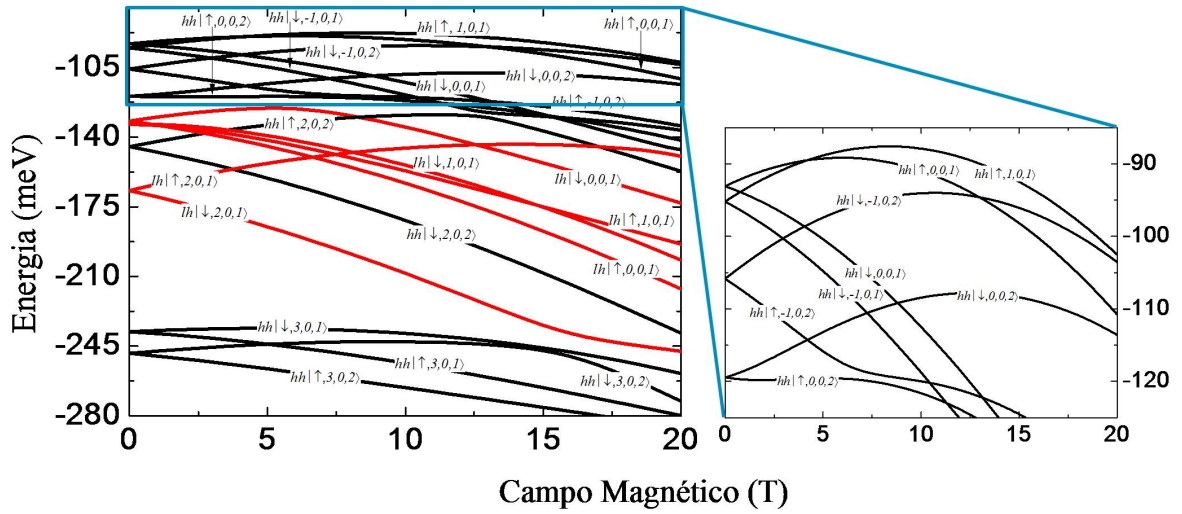


Figura 4.10: Níveis de energia da banda de valência em função do campo magnético aplicado no anel para uma largura  $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$  e um raio de  $R = 14.0 \text{ nm}$ , calculada com um *strain* no plano  $\varepsilon_{\parallel} = 0.0137$ . Os principais caráter dos níveis de energia são indicados.

A Fig. (4.11) nos mostra que o campo magnético também faz com que haja mudanças no caráter do estado fundamental. Nesta figura, podemos ver, por exemplo, que para o

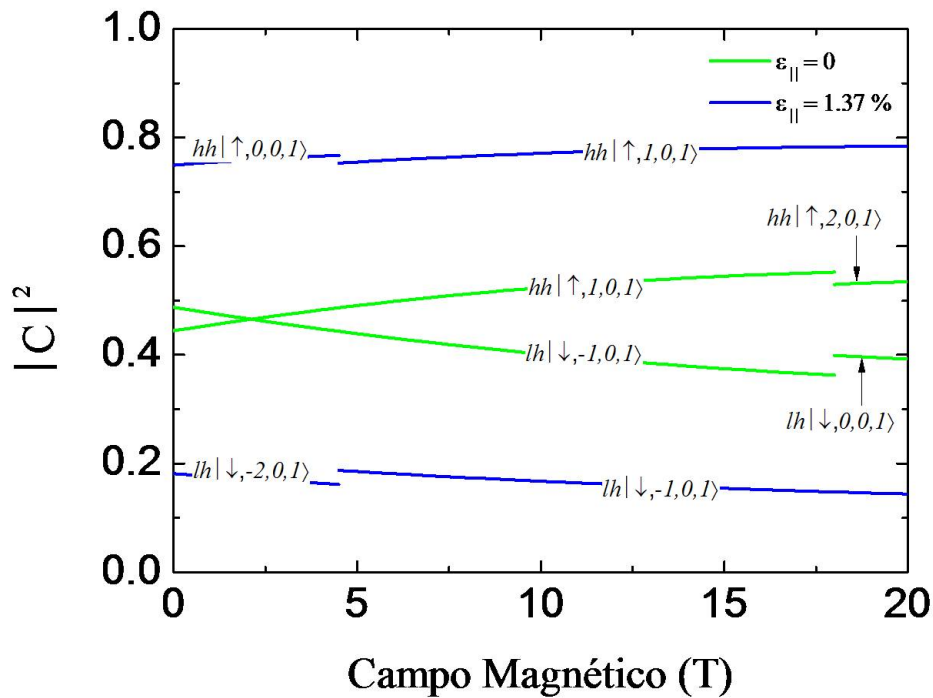


Figura 4.11: Coeficientes da expansão da função de onda do estado fundamental da banda de valência em função do campo magnético aplicado em um anel de raio  $R = 14.0 \text{ nm}$  e largura efetiva  $\Delta r = 2.29 \text{ nm}$ , calculado com e sem *strain*.

caso sem *strain* o anel, assim como na Fig. (4.5), manifesta mudanças drásticas no caráter do estado fundamental quando variamos o campo magnético. Essas mudanças, mostram que o caráter dominante pode variar entre  $lh$  no topo da banda de valência próximo de  $B = 0 T$  ou  $hh$  para campo magnéticos maiores do que  $2 T$ , sendo  $hh|\uparrow, 1, 0, 1\rangle$  até  $18 T$  e  $hh|\uparrow, 2, 0, 1\rangle$  entre  $18$  e  $20 T$ . Quando o anel está sob o efeito do *strain*, o caráter dominante é sempre  $hh$ , porém seu caráter varia entre os estados  $hh|\uparrow, 0, 0, 1\rangle$ , até de  $5 T$ , e  $hh|\uparrow, 1, 0, 1\rangle$ , acima. Este comportamento ainda não havia sido observado nos casos com *strain* antes de aplicarmos um campo magnético.

# Capítulo 5

## CONCLUSÕES

Neste trabalho pretendeu-se caracterizar, de forma abrangente, propriedades de anéis quânticos semicondutores e estudar os fundamentos teóricos para a análise da estrutura eletrônica de nanoestruturas semicondutoras. Inicialmente, foi feita uma análise de propriedades fundamentais dos semicondutores em particular dos sistemas baseados em compostos de *GaAs* e *InAs*, e da liga ternária *InGaAs*, que fazem parte das amostras experimentais que motivaram este estudo. Em seguida, foram introduzidas as ferramentas matemáticas utilizadas nos cálculos da estrutura eletrônica, tanto da banda de condução quanto da banda de valência, o método **k.p**, a aproximação de massa efetiva, o Hamiltoniano de Luttinger e efeitos de *strain*.

Para a estrutura eletrônica da banda de condução de uma anel quântico, foram analisados e contrastados os casos em uma e três dimensões. No caso unidimensional ilustramos que os níveis de energia manifestam uma estrutura periódica com o *quantum* de fluxo magnético, em forma de parábolas para os diferentes valores de  $m$  apresentados na Fig. (3.2) que se tornam mais largas quando diminuimos o raio do anel. Para o caso tridimensional pôde-se notar nas Figs. (3.4 e 3.5) que a aplicação de um campo magnético faz com que os vales das bandas de energia sejam deslocados para valores de energia maiores, e isso ocorre com mais intensidade quão maior for o valor de  $m$ . Além disso, também ficou claro que o modelo tridimensional se aproxima do modelo unidimensional para pequenos valores de largura efetiva.

Em seguida utilizamos as funções analíticas da equação 3.41 como base para a diagonalização do Hamiltoniano de Luttinger  $H_L$  na equação 4.9 para o cálculo da estrutura eletrônica da banda de valência, onde foram escritos todos os elementos de matriz e obti-



das expressões analíticas que permitiram compactar a representação do Hamiltoniano e sua separação em subespaços de Hilbert ortogonais (isto reduziu o volume e tempo de cálculo numérico).

Para a banda de valência, foi analisada a variação da energia em função de parâmetros como: raio, largura e campo magnético aplicado, além da influência do *strain*. Nesta análise pudemos notar que a valores do raio, entre 6 e 10 *nm*, e da largura efetiva, entre 2 e 4 *nm*, ocorreram nitidamente cruzamentos e anti-cruzamentos de níveis. Variações nas dimensões do anel permitem modular o caráter do estado fundamental da banda de valência. Isto certamente terá reflexos na resposta óptica destes sistemas. Os resultados da energia em função do campo magnético mostram, além da interação entre os estados, cruzamentos e anti-cruzamentos, a degenerescência em estados de *spin* ( $\uparrow$ ) e ( $\downarrow$ ), ilustrado claramente nas figuras (4.9 e 4.10).

As ferramentas e resultados construídos neste trabalho permitem sua aplicação direta na simulação da resposta óptica de anéis quânticos que será o passo imediato a ser realizado. A extensão do cálculo da estrutura eletrônica para sistemas de anéis quânticos acoplados verticalmente (motivada pela existência de amostras desta natureza) resulta também um problema tratável dentro do mesmo marco teórico. Existem também questões que não podem ser simuladas a partir das aproximações assumidas neste trabalho. Em particular o problema de anéis alongados (elípticos) e sua resposta óptica anisotrópica terá que ser tratado num modelo de bandas que inclua o acoplamento entre as bandas de condução e valência (por exemplo o modelo de Kane 8x8) conjuntamente com métodos perturbativos que simulem a quebra de simetria axial. Este último problema compõe a proposta de continuação desta linha de pesquisa.

## 5.1 Trabalhos Apresentados em Congressos no Período da Dissertação

Lopes, V. N. ; Lopez-Richard, V. . Electronic Structure in Nanoscopic Rings. I Encontro Nacional da Rede Nacional de Nanobiotecnologia Aplicada à Medicina e à Defesa (ReN2AMeD), 2010, São Carlos-SP.

Lopes, V. N. ; Lopez-Richard, V. . Study of Electronic Properties of Quantum Rings. 1<sup>a</sup> School of Advanced Science: Spintronics and Quantum Computation, 2010, São Carlos-SP.

# Referências Bibliográficas

- [1] J. M. Garcia, G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmidt, T. Ngo, J. L. Feng, A. Lorke, J. Kotthaus, P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2014 (1997).
- [2] A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. García, P. M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223 (2000).
- [3] F. M. Alves, C. Trallero-Giner, V. Lopez-Richard, G. E. Marques *Phys. Rev. B* **77**, 035434 (2008).
- [4] M. Grochol, F. Grosse, R. Zimmermann, *Phys. Rev. B* **74**, 115416 (2006).
- [5] P. A. Orellana, M. Pacheco, *Phys. Rev. B* **71**, 235330 (2005).
- [6] I. R. Sellers, V. R. Whiteside, I. L. Kuskovsky, A. O. Govorov, B. D. McCombe, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 136405 (2008).
- [7] A. G. Aronov, Yu. V. Sharvin, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 755 (1987).
- [8] T. Chakraborty, P. Pietiläinen, *Phys. Rev. B* **50**, 8460 (1994).
- [9] D. Mailly, C. Chapelier, M. Benoit, *ibid.* **70**, 2020 (1993).
- [10] A. Emperador, M. Barranco, E. Lipparini, M. Pi, Ll. Serra, *Phys. Rev. B* **59**, 15301 (1999).
- [11] L. Wendler, V. M. Fomin, A. V. Chaplik, A. O. Govorov, *Phys. Rev. B* **54**, 4794 (1996).
- [12] C. Dahl, J. P. Kotthaus, H. Nickel, W. Schlapp, *Phys. Rev. B* **48**, 15480 (1993).
- [13] M. D. Teodoro, *Efeito Aharonov-Bohm em Partículas Neutras*, Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos, 2011. Tese.

- [14] J. H. Neave, B. A. Joyce, *J. Cryst. Growth* **44**, 357 (1978).
- [15] J. R. Arthur, *J. Appl. Phys.* **30**, 9, 4032 (1968).
- [16] A. Y. Cho, *J. Appl. Phys.* **41**, 2780 (1970).
- [17] Y. Aharonov, D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
- [18] D. Granados, J. M. García, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 2401 (2003).
- [19] M. Hanke, Yu. I. Mazur, E. Marega, Z. Y. AbuWaar, G. J. Salamo, P. Schafer, M. Schmidbauer, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 043103 (2007).
- [20] E. Marega Jr, Z. A. Waar, G. J. Salamo, Optical Properties of Coupled bi-layers of InAs/GaAs Quantum Rings Nanostructures. In: 13th Brazilian Workshop of Semiconductor Physics, Sao Paulo, 2007.
- [21] I. R. Sellers, V. R. Whiteside, I. L. Kuskovsky, A. O. Govorov, B. D. McCombe, *Phys. Rev. Lett.* **100** 136405 (2008).
- [22] R. A. Römer, M. E. Raikh, *Phys. Rev. B* **62** 11 (2000).
- [23] A. V. Chaplik, *JETP Lett.* **62** 11 (1995).
- [24] E. O. Kane, *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 249 (1957).
- [25] M. H. Weiler, Magneto-optical Properties of Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te Alloys. v. 16. New York: Academic Press, 1981.
- [26] S. M. Sze, Physics of Semiconductors Devices. New York: Wiley, 1981.
- [27] B. K. Ridley, Quantum Processes in Semiconductors. Oxford: Clarendon Press, 1982.
- [28] Yu. F. Biryulin, N. V. Ganina, M. G. Mil'vidskii, V. V. Chaldyshev, Yu. V. Shmartsev, *Sov. Phys. Semicond.* **17** (1983).
- [29] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid States Physics. New York: Saunders College, 1976.
- [30] F. Bassani, Methods of Band Calculations Applicable to III-V Compounds. v. 1. New York: Academic Press, 1996.

- [31] J. Bardeen, *J. Chem. Phys.*, **6**, 367-371 (1938).
- [32] F. Seitz, *The Modern Theory of Solids*. cap. 10, p. 352, New York: McGraw Hill, 1940.
- [33] E. F. Schubert, *Quantum Mechanics Applied to Semiconductor Device*. New York: Wiley, 1986.
- [34] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*. New York: Wiley, 1990.
- [35] Y. Sun, S. E. Thompson, T. Nishida, *Strain Effect in Semiconductors*. New York: Springer, 2010.
- [36] S. Datta, *Modular Séries on Sólid States Devices (Quantum Phenomena)*. v. 8. Addison Wesley, 1989.
- [37] R. Winkler, *Springer Tracts in modern Physics (Spin-orbit Coupling Effects in two-Dimensional Electron and Hole Systems)*. v. 191. 2003.
- [38] E. O. Kane, *J. Phys. Chem. Solids*, **1**, 82-99 (1956).
- [39] E. O. Kane, *The  $\vec{k}\cdot\vec{p}$  Method in: Semiconductor and Semimetals*. (R. K. Willardson and A. C. Beer), cap. 3, v. 1. New York: Academic Press, 1966.
- [40] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956).
- [41] P.-O. Löwdin, *J. Chem. Phys.* **19**, 1396 (1951).
- [42] 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.
- [43] E. Kane, *Physics of III-V Compounds*. v. 1. p. 75, New York: Academic Press, 1966.
- [44] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. Erlangen: Springer, 2003.
- [45] K. Suzuki, J. C. Hensel, *Phys. Rev. B* **9**, 4184 (1974).
- [46] H. R. Trebin, U. Rössler, R. Ranvaud, *Phys. Rev. B* **20**, (1979).

- [47] G. L. Bir, G. E. Pikus, Symetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors. New York: Wiley, 1974.
- [48] R. Hook, The Potentia Restitutiva. London, 1678.
- [49] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Theory of Elasticity. v. 7. 2 ed. Pergamon, 1959.
- [50] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, *Appl. Phys. Rev.* **89**, 11 (2001).
- [51] M. D. Teodoro, V. L. Campos, Jr., V. Lopez-Richard, E. Marega, Jr., G. E. Marques, Y. Galvão Gobato, F. Iikawa, M. J. S. P. Brasil, Z. Y. AbuWaar, V. G. Dorogan, Yu. I. Mazur, M. Benamara and G. J. Salamo, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 086401, (2010).
- [52] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory). v. 3. 3 ed. 1977.
- [53] W.-C. Tan and J. C. Inkson, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 1635-1641 (1996).
- [54] G. Arfken, Mathematical Methods for Physicists. London: Academic Press, 1970.
- [55] L. I. Schiff, Quantum Mechanics. 1 ed. McGraw, 1949.