

Sistemas Bidimensionais Modulados na Presença de Campo Magnético

Aluno: Manuel Almeida Andrade Neto

Orientador: Prof. Dr. Peter A. B. Schulz

Tese submetida ao
Instituto de Física "Gleb Wataghin"
para obtenção do Título de Doutor em Física
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Dezembro - 96

Este exemplar corresponde à redação final da tese de doutorado
defendida pelo aluno Manuel Almeida Andrade Neto e aprovada
pela comissão julgadora

14/05/97 Peter A. B. Schulz

M

UNIDADE IFGW

N.º CHAMADA:

T/Unicamp

An. 24s

V. E.

T. 000 BS/ 30772

PROC. 281/97

C ☐ D ☒

PREÇO R\$ 11,00

DATA 13/06/97

N.º CPDC 4.000.98471-8

IF/1076

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IFGW- UNICAMP

An24s

Andrade Neto, Manuel Almeida

Sistemas bidimensionais modulados na presença de campo magnético / Manuel Almeida Andrade Neto. -- Campinas, SP : [s. n.] , 1996.

Orientador: Peter A. B. Schulz.

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Física do estado sólido. 2. Hall, efeito quântico de. 3. Superestrutura como material. 4. Teoria de bandas de energia em sólidos. I. Schulz, Peter A. B. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

PARECER DE APROVAÇÃO
DEFESA DE TESE DE DOUTORADO
MANUEL ALMEIDA ANDRADE NETO

DATA: 20.12.96

BANCA EXAMINADORA:

- Prof. Dr. PETER ALEXANDER BLEINROTH SCHULZ (Orientador)

Peter A.B. Schulz

- Profa. Dra. BELITA KOILLER

Belita Koiller

- Prof. Dr. NELSON STUDART FILHO

Nelson Studart

- Prof. Dr. GUILLERMO GERARDO CABRERA OYÁRZUN

Guillermo Cabrera

- Prof. Dr. BERNARDO LAKS

Bernardo Laks

Agradecimentos.

Ao professor Dr. *Peter Alexander Bleinroth Schulz*, pelo respeito e amizade desenvolvidos ao longo deste trabalho e pela sugestão do tema desta tese.

À minha esposa *Cristiane Klein Andrade*, pelo apoio e por ter aguentado a barra firme todo este tempo.

Aos meus amigos em ordem aleatória, *Marcos Ávila*, *Bajay*, *Raquel*, *Boselli João Paulo & Elis*, *Pablo Rivera*, *Rafael*, *Rudson*, *Cristóvão*, *Kazuo*, *Caluzi*, *Nilton (Nini)* e demais colegas do prédio D.

Aos funcionários da secretaria de Pós-Graduação, *Márcia*, *Armando* e em especial à *Maria Ignes*.

Aos demais professores e funcionários do IFGW e da UNICAMP que de uma maneira ou outra contribuíram para este trabalho.

Agradeço ainda e fundamentalmente ao Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento - CNPq¹, cuja bolsa de Doutorado concedida a mim tornou possível a realização deste trabalho.

Obrigado.

¹Este trabalho foi suportado financeiramente pelo CNPq

*para Vinicius Klein Andrade,
meu filho.*

Who needs information

When you're living in constant fear

Roger Waters, radio K.A.O.S.

SISTEMAS BIDIMENSIONAIS MODULADOS NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO

RESUMO

Neste trabalho discutimos as propriedades eletrônicas de um sistema bidimensional com modulação periódica de potencial na presença de um campo magnético perpendicular ao plano do sistema.

Trata-se de um problema acadêmico estudado desde os primórdios da Mecânica Quântica, envolvendo espectros de energia auto-similares. A existência de várias questões em aberto e o avanço recente de técnicas experimentais, para fabricação desses sistemas com parâmetro de rede da modulação arbitrário, reforçam o interesse no problema nos últimos anos. Apresentamos um modelo que possibilita estudar unificadamente os regimes de modulação fraca e forte e a transição entre eles. Efeitos de borda em cristais são analisados. Os diferentes limites do problema, bem como a caracterização de estados de um sistema específico (bilhar de Sinai periódico) são discutidos.

Finalmente, apresentamos algumas condições mínimas necessárias para a observação experimental desses espectros de energia auto-similares (Borboletas de Hofstadter acopladas).

ABSTRACT

In this work we discuss the electronic properties of a bidimensional system with periodic potential modulation in the presence of a magnetic field perpendicular to the plane of the system.

It consist of an academic problem which has been studied since the early days of Quantum Mechanics involving autosimilar energy spectra. The existence of many open questions and the recent advance in experimental techniques, opening the possibility of manufacturing of these systems with arbitrary lattice parameter, have reinforced the interest in the problem in the past years. We present a model that make possible to study in a unified picture the weak modulation regime, the strong modulation regime and the transition between them. Edge effects in crystals were analised. The different limits of the problem, and also the characterization of the states of an especific system (Sinai's periodic bilhar) are discussed.

Finally, we present some minimal and necessary conditions to observe these autosimilar energy spectra experimentally (coupled Hofstadter's butterfly).

Conteúdo

1	Introdução	5
1.1	Gás de Elétrons Bidimensional	5
1.2	Cristais Bidimensionais Artificiais	7
1.3	Abordagem Teórica do Cristal 2D Artificial	10
1.4	Espectro de Energia Auto-similar: Borboleta de Hofstadter	11
1.5	Introdução à esta tese	14
1.5.1	Extensão do Modelo TB para Cristais Artificiais 2D	14
1.5.2	Descrição dos Capítulos Seguintes	15
2	Sistemas 2D Modulados com Campo Magnético	16
2.1	Análise Qualitativa: Problema Real e o Método da Ligação Forte	16
2.2	Rede Quadrada de Orbitais Tipo s	19
2.3	Inclusão de B	24
2.3.1	Substituição de Peierls	24
2.3.2	Aplicação da Hipótese de Peierls	25
2.4	Efeitos de Modulação	27
3	Sistemas Confinados: Estados Laterais e de Volume	35
3.1	Breve Histórico	36
3.2	Modelo Utilizado	37
3.3	Discussão dos Resultados	39
3.4	Estados de Borda $\times$ Espectro de Hofstadter	45

3.5	Densidade de Probabilidade e Elementos de Corrente	47
3.6	Sumário	54
4	Redes de “Antidots”	56
4.1	Introdução	56
4.2	Estrutura Eletrônica e Espectro de Energia	57
4.3	Estrutura Fina do Espectro	59
4.4	Caracterização dos Estados	62
5	Conclusões	72
5.1	Observabilidade experimental da Borboleta de Hofstadter	72
5.2	Comentários Finais	74
A	Translações Magnéticas	76
B	Hamiltoniano tight-binding para um sistema 2D	82
C	Campo Magnético + Hamiltoniano tight-binding 2D	88
C.1	Extensão para a Superrede Lateral	90

Capítulo 1

Introdução

A tecnologia atingida hoje em dia na fabricação de dispositivos semicondutores fornece meios de se confinar elétrons nas três dimensões espaciais em caixas nanodimensionais. O transporte de elétrons através destes “átomos artificiais”, onde a carga nuclear é trocada pelo potencial de confinamento (espalhamento no caso de uma coluna de potencial), mostra comportamentos singulares. O acoplamento de uma estrutura deste tipo, isto é, vários “dots (antidots)” dentro de uma rede plana artificial abre a possibilidade de se estudar as propriedades físicas destes cristais artificiais, conhecidos por superredes laterais.

Assim como estes “dots (antidots)” são caracterizados por níveis de energia, os cristais artificiais possuem uma estrutura de bandas, onde as propriedades dos “átomos” que a constituem são agora controladas pela superposição do potencial periódico, em outras palavras, há flexibilidade no controle dos parâmetros que constituem o cristal. Dessa forma pode-se construir dispositivos menos limitados que os materiais convencionais encontrados na natureza.

1.1 Gás de Elétrons Bidimensional

Sem dúvida o maior ímpeto no estudo dos cristais artificiais foi a obtenção experimental de um sistema quasi-ideal no qual os elétrons sentem um confinamento bidimensional. Di-

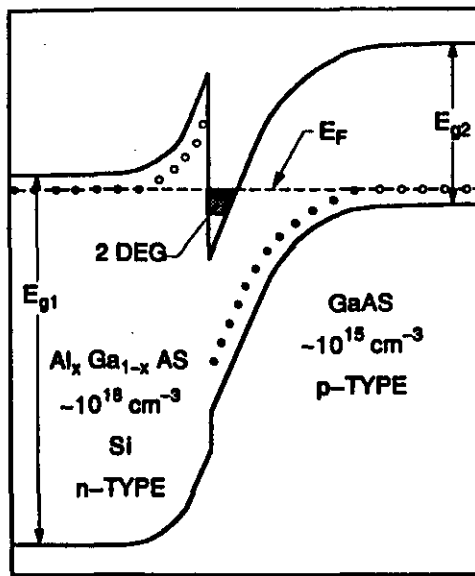


Figura 1.1: Diagrama de energia interface da heteroestrutura de GaAs [T. Chakraborty and P. Pietiläinen, "The Quantum Hall Effects - Fractional and Integral, 2nd edition, Springer Verlag, 1995.].

namicamente os elétrons são bidimensionais devido ao fato de serem livres para se moverem em somente duas dimensões espaciais. Na terceira dimensão eles possuem níveis de energia quantizados [1].

Camadas de elétrons tem sido criadas em muitos sistemas diferentes. Elétrons na superfície de Helio líquido fornece um sistema bidimensional praticamente ideal [2]. O confinamento neste caso se dá através da combinação de um campo externo e um potencial imagem. A concentração de elétrons neste sistema é pequena $\sim 10^5 - 10^9 \text{ cm}^{-2}$ – e este se comporta classicamente [3]. Sistemas eletrônicos bidimensionais de alta densidade são obtidos nos transistores de efeito de campo de Metal-Óxido-Semicondutor (Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor, MOSFET) e em heterojunções semicondutoras sendo as mais comuns em experimentos as de GaAs/InP [4]; HgTe/CdTe [5]; InAs/GaSb [6], com formação de elétrons e buracos; heteroestruturas de GaAs (muitos autores); sistemas a base de SiGe [7] e Si-MOSFETs [8]. A estrutura a base de Si-MOSFET é bem interessante já que permite uma variação da concentração eletrônica em uma faixa bem larga: $n_0 \approx 0 - 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ [9].

Entretanto, o sistema mais utilizado para obtenção dos cristais bidimensionais artificiais são as heteroestruturas a base de GaAs/Al_xGa_{1-x}As ($0 < x \leq 1$). As constantes de rede do GaAs e do Al_xGa_{1-x}As são muito próximas, fornecendo uma interface quase livre de desordem. O “gap” da liga com Al é maior que o do GaAs e aumenta com a concentração de alumínio x . Os portadores na vizinhança da heteroestrutura passam da liga dopada de AlGaAs através da interface para as bandas mais baixas do GaAs. O campo elétrico devido à transferência de carga deforma o perfil de potencial, conforme Fig.1.1. Um poço quasi-triangular ($\sim 100\text{\AA}$) se forma no GaAs retendo os elétrons como portadores bidimensionais.

1.2 Cristais Bidimensionais Artificiais

Existem basicamente dois exemplos de potenciais periódicos superpostos ao plano de cargas formando um cristal bidimensional, ambos obtidos experimentalmente [10], Figs. 1.3a e 1.3b.

A Fig. 1.3a mostra o perfil do potencial no caso de modulação fraca enquanto que a Fig. 1.3b é o caso oposto, i. é, forte modulação do potencial. Em ambos os casos a energia de Fermi é usada como fator de escala. O perfil característico do caso da Fig.1.3b é o comumente obtido na fabricação das redes de “antidots” [11]. Nestes cristais bidimensionais artificiais, o parâmetro de rede maior permite a procura por novos fenômenos qualitativos, não acessíveis nos cristais naturais. Como exemplo máximo nesse contexto citamos o espectro de energia fractal dos elétrons de Bloch em campos magnéticos [12, 13, 14].

O ponto de partida para a fabricação de superredes laterais é o gás de elétrons bidimensional (Two Dimensional Electrons Gas - 2DEG) formado na interface da heterojunção GaAs/AlGaAs. Alta mobilidade é um ingrediente essencial, assegurando ao elétron um livre caminho médio, l_e , bem maior do que o parâmetro de rede a do potencial periódico superimposto. Caminhos livres médios típicos nestas amostras variam de 5 a 10 μm antes da confecção dos furos.

Uma descrição detalhada da nanofabricação destes cristais é deixada a cargo da literatura, sendo que um esquema resumido é mostrado na Fig.1.2a e 1.2b. Na Fig.1.2c vemos

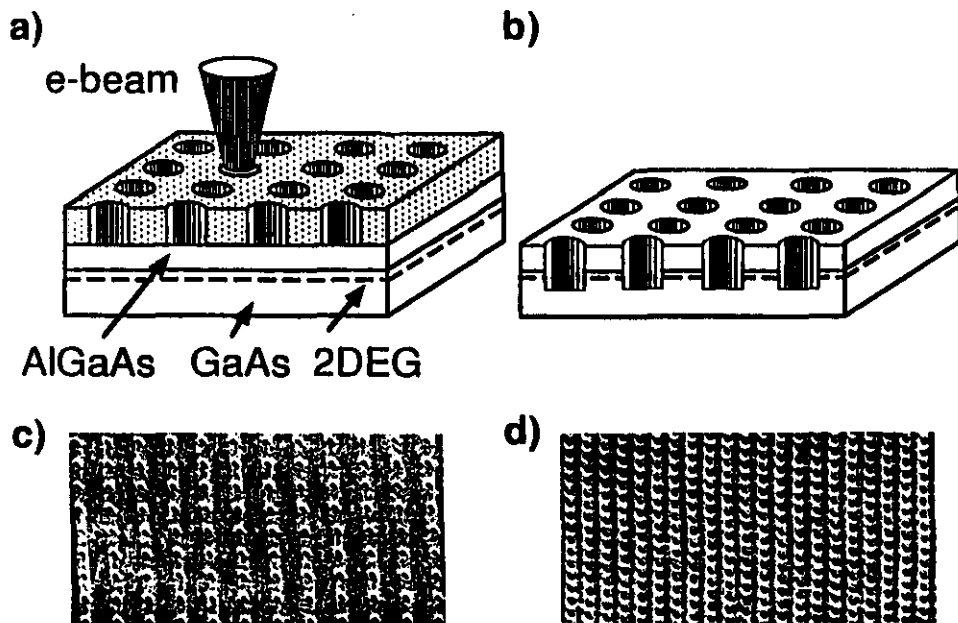


Figura 1.2: (a) Fabricação (esquemática) de uma rede de antidots por litografia de feixe eletrônico. (b) Etching dos buracos através do 2DEG. (c) Fotografia em microscópio de varredura eletrônica de uma rede quadrada de antidots de parâmetro de rede $a=300$ nm. (d) mesmo que em (c), exceto parâmetro de rede que agora é de $a=200$ nm [D. Weiss *et al*, Surf. Sci **308**, 408 (1994).].

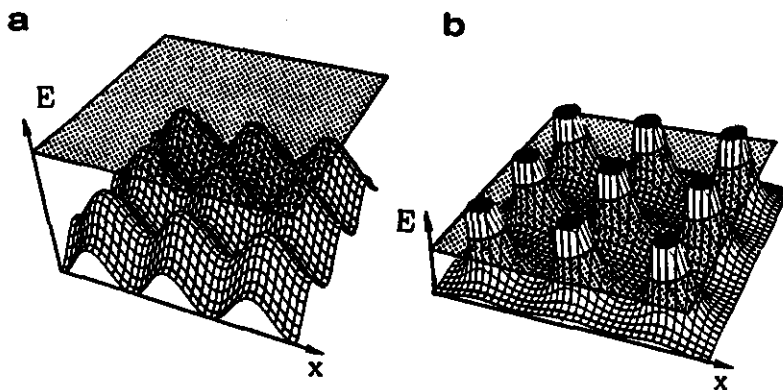


Figura 1.3: Perfil da banda de condução no plano x - y para (a) fraca modulação de potencial e (b) forte modulação de potencial. A posição do nível de fermi é mostrada nas duas figuras[D. Weiss *et al*, Surf. Sci 308, 408 (1994).].

o resultado final do processo: um plano de cargas furado periódicamente com parâmetro de rede $a=3000 \text{ \AA}$ (distância entre furos sucessivos). O diâmetro dos furos é de cerca de $800 \text{ \AA}$ e eles se comportam como uma barreira praticamente impenetrável para os elétrons. Esta estrutura é o cristal bidimensional artificial. Na Fig.1.2d temos o mesmo resultado para um parâmetro de rede menor, $a=2000 \text{ \AA}$.

Experimentos para medidas de efeito Hall, infravermelho longínquo e magnetoresistividade [15, 16, 17] mostram aspectos peculiares, sendo que os principais esforços experimentais se concentram nas propriedades de magnetotransporte. A observação do espectro de energia auto-similar, uma meta experimental de longa data, não foi atingida até o presente - Dezembro de 1996.

1.3 Abordagem Teórica do Cristal 2D Artificial

Os resultados experimentais obtidos incentivaram o estudo de modelos que descrevessem um plano de cargas (elétrons confinados em duas dimensões) sobre o qual é gerada uma rede de potenciais periódicos. Os 2DEG estão muito próximos de condições ideais e servem inclusive como teste para modelos teóricos.

Por outro lado, independente dos resultados experimentais atuais, o estudo de elétrons em um cristal – elétrons de Bloch – sujeitos a campo magnético não é recente, mas questões fundamentais relacionadas a estes sistemas permanecem em aberto.

O tratamento utilizado usualmente considera elétrons não interagentes movendo-se em uma rede plana perfeitamente ordenada. A Hamiltoniana que descreve este sistema é

$$H = \frac{1}{2m^*} \sum_{i=x,y} (p_i + eA_i)^2 + U(x, y).$$

Esta é uma Hamiltoniana de uma única partícula, já que a interação mútua de elétrons não é levada em conta. m^* é a massa efetiva dos elétrons no fundo da banda de condução do material hospedeiro. No caso das interfaces de AlGaAs/GaAs este material é o GaAs. Cada elétron move-se no plano x - y e está sujeito a um campo magnético uniforme $\mathbf{B}$ perpendicular ao plano de cargas tal que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, $\mathbf{A}$ sendo o vetor potencial. O termo $U(x, y)$ representa o potencial periódico de uma rede quadrada, o qual satisfaz

$$U(x, y) = U(x + a, y) = U(x, y + a),$$

com a sendo o parâmetro de rede (distância entre colunas de potencial sucessivas). Não há desordem nos potenciais iônicos. O potencial periódico $U(x, y)$ geralmente utilizado na modelagem dos “antidots” é do tipo

$$U(x, y) = U_0 [\cos(2\pi x) \cos(2\pi y)]^\beta,$$

onde β controla o diâmetro das colunas de potencial. A escolha do calibre para o vetor potencial $\mathbf{A}$ recai em dois tipos: $\mathbf{A} = B(0, x, 0)$ - calibre de Landau ou $\mathbf{A} = B(-y/2, x/2, 0)$ - calibre simétrico. No caso particular em que $U(x, y) = 0$ a solução da Hamiltoniana anterior são os níveis de Landau, $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$.

Utilizando a descrição acima, a grande maioria dos estudos teóricos, principalmente relativos às propriedades de magnetotransporte, em um potencial periódico bidimensional tem se concentrado em estruturas essencialmente macroscópicas [18, 19, 20]. Modulação fraca do potencial tem sido o caso mais extensivamente considerado. Recentemente uma abordagem totalmente quântica do sistema é feita utilizando-se um Hamiltoniano na descrição tight-binding (TB) [21].

Neste tipo de enfoque, o Hamiltoniano tight-binding (TB) bidimensional elementar para uma rede quadrada em campo magnético é

$$H = V_{i,j} \sum_{i,j} |i,j\rangle e^{i2\pi\phi_{ij}} \langle i,j|,$$

onde $\varepsilon_0 \equiv 0$. i e j são sítios primeiros vizinhos e ϕ_{ij} é o fator de fase do campo magnético. $V_{i,j}$ é o parâmetro de “hopping” entre sítios adjacentes. É comum nestes tratamentos considerar o calibre de Landau.

1.4 Espectro de Energia Auto-similar: Borboleta de Hofstadter

Assumindo uma dispersão do tipo TB para $E_{\mathbf{k}}$ Harper [22] obteve, utilizando calibre de Landau, $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$, a seguinte equação de Schrödinger:

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + 2 \cos \left[2\pi \frac{eBa^2}{h} (n + \varphi) \right] \psi_n = E\psi_n,$$

para uma rede $x = a(n + \varphi)$, a qual exhibe espectro de energia auto-similar em função do campo [12, 13] conhecido pelo nome de Borboleta de Hofstadter (“Hofstadter Butterfly”). Quando o número de quanta de fluxo por célula unitária do potencial periódico,

$$\frac{Ba^2}{h/e} = \phi/\phi_0 = p/q,$$

com p/q sendo um número racional então a banda se divide em q subbandas que não se tocam, cada uma com um número igual de estados. Para valores irracionais de p/q o número

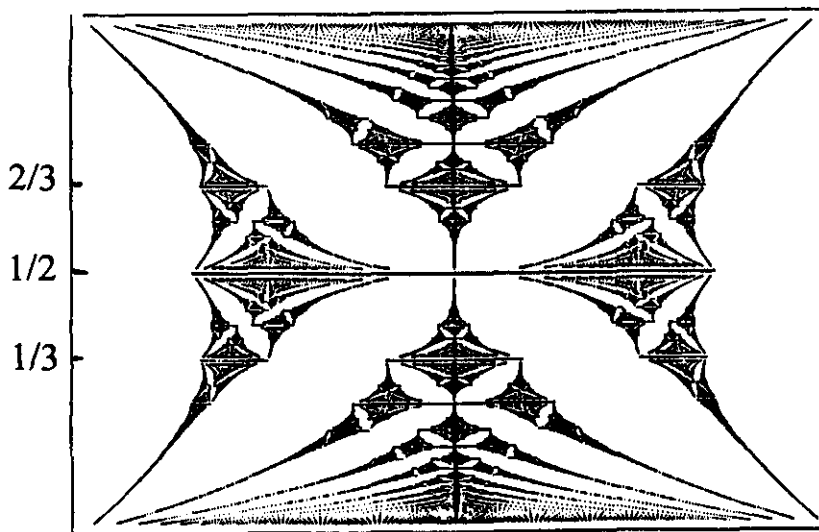


FIG. 1. Spectrum inside a unit cell. ϵ is the horizontal variable, ranging between $+4$ and -4 , and $\beta = \{\alpha\}$ is the vertical variable, ranging from 0 to 1 .

Figura 1.4: Espectro dentro de uma célula unitária. Eixo horizontal: Energia, $-4 \leq \epsilon \leq 4$. Eixo Vertical: $\alpha = p/q$, $0 \leq \alpha \leq 1$, conforme artigo original de Hofstadter[D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B 14, 2239 (1976)].

de bandas é infinito mas os “gaps” que existem para valores racionais de p/q persistem por alguma faixa finita de p/q [23]. Na Fig.1.4 podemos identificar para valores de p/q pequenos (< 0.2) os ramos da borboleta são os níveis de Landau do caso não modulado, ou seja, o limite contínuo da rede discreta, quando o comprimento magnético, $l_c = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$ é muito maior que o parâmetro de rede.

Ainda com respeito ao gráfico do espectro de energia da Fig. 1.4 notamos que ele exibe uma estrutura recursiva, sendo que p/q equivale a $1 - p/q$. Tomando como exemplo $p/q = 1/3$ vemos que a banda se divide em 3 (q) subbandas menores (nos sistemas fortemente modulados o numerador indica o número de subbandas formadas). O mesmo acontece em $p/q = 2/3$ ($1 - p/q$). Os sítios do modelo TB de uma única célula unitária simulam um sistema de modulação periódica forte.

Por outro lado, nos casos teóricos estudados em que a modulação é fraca o espectro de energia em função do campo também é do tipo borboleta, porém com a razão inversa do número de fluxo, q/p e agora é o numerador que indica o número de subbandas formadas. Note que em ambos os casos é utilizado o índice q para o número de subbandas formadas

Padrão qualitativo do espectro de energia diamagnético

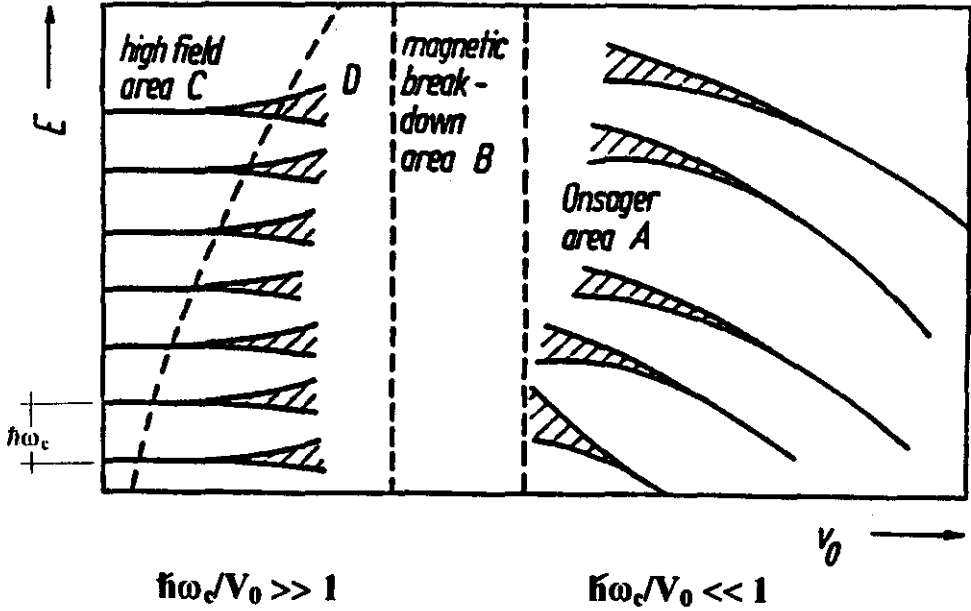


Figura 1.5: Energia em função da intensidade da modulação de potencial para um valor fixo de campo. Área C: modulação fraca, regime de Landau, espectro de energia do tipo Borboleta de Hofstadter com razão inversa do fluxo $1/\phi/\phi_0$. Área A: modulação forte do potencial, regime de Onsager, espectro de energia do tipo Borboleta de Hofstadter também, porém em relação direta com o fluxo ϕ/ϕ_0 . Área B: regime intermediário, desconhecido [H. W. Newmann and A. Rauh, Phys. Stat. Sol. (b) 96, 233 (1979).].

[23].

Na Fig.1.5 é mostrado um padrão qualitativo do espectro de energia em função da intensidade da modulação. As regiões A e C são bem conhecidas na literatura. Os regimes intermediários D e B (regime de “breakdown” magnético – região B), são os de comportamento menos conhecido [24].

1.5 Introdução à esta tese

1.5.1 Extensão do Modelo TB para Cristais Artificiais 2D

O principal objetivo desta tese é estudar, dentro de um mesmo modelo, a passagem do regime de modulação fraca (regime de Landau) ao regime de modulação forte (regime de Önsager). O conceito atual de intensidade de modulação é um tanto vago no contexto das superredes laterais na presença de um campo magnético. O valor absoluto da amplitude da modulação não é suficiente para definir esta intensidade já que tem de ser comparado à energia de quantização de Landau. O modelo desenvolvido neste trabalho possibilita variar continuamente a intensidade da modulação identificando a região de “crossover” entre os regimes de modulação fraca e forte, para um dado campo magnético [25].

Considerando as aproximações do trabalho de Hofstadter (Hamiltoniano TB de uma única banda e espaçamento cristalino da ordem de alguns Å) a pergunta que se faz é o quanto deste espectro sobreviveria em condições mais realísticas. Embora o perfil de potencial exato destas nanoestruturas seja desconhecido até o momento, modelos incluindo um maior número de bandas (células unitárias com mais de um único sítio, melhor descrição do perfil de potencial) ajudariam a responder esta pergunta.

Nesse sentido, o modelo desenvolvido no presente trabalho apresenta a versatilidade necessária para abordar essa questão. Além disso mostramos que propriedades físicas como densidades de probabilidade e, principalmente, densidades de corrente podem ser obtidas de maneira conveniente. Efeitos de borda também foram estudados, pois são de extrema

importância nesses cristais artificiais com razão de “volume”¹/superfície arbitrárias, sem contar o fato de que os estados laterais são fundamentais na interpretação de propriedades de magnetotransporte.

1.5.2 Descrição dos Capítulos Seguintes

No capítulo 2 é desenvolvido o modelo para cristais 2D artificiais na presença de campo magnético. São discutidos os regimes de modulação em função do campo magnético.

No capítulo 3 é estudado o efeito da presença de bordas sobre a superrede lateral descrita no cap. 2. Estudamos efeitos de tamanho do cristal artificial para um determinado número de células unitárias confinadas, bem como o acoplamento dos estados laterais com os estados de volume.

No capítulo 4 expandimos ainda mais a célula unitária obtendo assim um sistema mais próximo das nanoestruturas fabricadas em experimentos [26]. Importantes detalhes do espectro eletrônico em função do fluxo magnético aparecem nessa descrição mais realista sem invalidar os resultados obtidos no cap. 2. Com essa base mais ampla, as densidades de probabilidade são melhor descritas e associações com resultados semiclássicos passam a ser possíveis.

Finalmente, no capítulo 5 apresentamos nossas conclusões bem como uma breve discussão sobre a observabilidade desses espectros autosimilares.

¹volume aqui está entre aspas para indicar que no caso estamos trabalhando com um sistema bidimensional e o volume significa um volume 2D

Capítulo 2

Sistemas 2D Modulados com Campo Magnético

2.1 Análise Qualitativa: Problema Real e o Método da Ligação Forte

A aproximação de ligações fortes tem uma longa história no estudo das propriedades eletrônicas de sólidos. Neste trabalho nos restringiremos a utilizar a analogia entre o problema real – superredes laterais na presença de um campo magnético – e a simulação desse sistema por meio de uma aproximação de ligações fortes.

Na situação real temos um sistema quasi-2D¹ na interface de dois materiais – GaAs/AlGaAs – constituindo uma heterojunção. Através de técnicas litográficas descritas com mais detalhes no capítulo 1 esse plano pode ser perfurado formando uma rede periódica de furos. Também é possível preencher esses furos com materiais que podem atuar como “dots” ou “antidots”. Os elétrons possuem mobilidade alta (dependendo da qualidade da amostra) e assim movem-se pelo plano, sendo espalhados pelas regiões do tipo “antidot”

¹assume-se que na dimensão z temos um poço estreito com somente um estado disponível – uma subbanda apenas – típico de sistemas quasi-2D e portanto não relevante para o estudo das propriedades bidimensionais, G. W. Bryant, *Phys. Rev. B*, **40**, 1620, (1989).

ou confinados em regiões de “dots”. Neste trabalho estamos principalmente interessados na configuração tipo “antidot”. Temos então barreiras de potencial dispostas periodicamente, sendo a separação destas barreiras de potencial pequenas ($\simeq 300$ nm) o suficiente para que fenômenos quânticos ocorram, havendo uma modificação da estrutura eletrônica do plano original [27, 10, 11, 18]. Uma boa revisão do perfil de potencial destas estruturas do tipo “antidot” encontra-se em [10]. A estrutura eletrônica do material hospedeiro (fundo da banda de condução do GaAs) é bem descrita na aproximação de massa efetiva [28, 29]:

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

m^* = massa efetiva do elétron no GaAs. Assim temos um quadro de elétrons independentes com massa renormalizada (massa efetiva) que vão agora adicionalmente sentir o potencial periódico dos “furos”. Em resumo, temos um problema de cálculo de estrutura eletrônica de um cristal bidimensional artificial:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} + \frac{1}{dy} \frac{1}{m(y)} \frac{d}{dy} \right] + V(x, y) \right\} \Psi(x, y) = E \Psi(x, y), \quad (2.2)$$

onde $V(x, y)$ = potencial periódico, e entre colchetes temos o operador energia cinética que leva em conta a variação de massa efetiva. Como no plano considerado a massa efetiva não varia (plano homogêneo), podemos então reescrever a equação anterior com o operador $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi$ em vez da forma de BenDaniel e Duke na equação (2.2) acima [30].

Deixamos de lado, por enquanto, $V(x, y)$ e resolvemos o problema numericamente transformando a equação de Schrödinger (equação diferencial) em uma equação a diferenças finitas. Para um problema unidimensional temos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \Psi(x) &= \frac{\Psi_{n+1} - \Psi_n}{a} \\ \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) &= \frac{1}{a^2} (\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1}). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Substituindo a última linha da equação acima na equação (2.2) obtemos a equação de Schrödinger a diferenças finitas,

$$\left[E - 2 \left(\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \right) \right] \Psi_n = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \right) \Psi_{n+1} + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \right) \Psi_{n-1}. \quad (2.4)$$

Tomando-se o caso do Hamiltoniano TB para uma rede periódica unidimensional de sítios com interação somente entre primeiros vizinhos, podemos escrevê-lo como

$$H = \sum_i \left[\varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} V_{ij} |i\rangle \langle j| \right], \quad (2.5)$$

com a função de onda dada por

$$\Psi = \sum_i c_i |i\rangle. \quad (2.6)$$

Substituindo essas expressões na equação de Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi, \quad (2.7)$$

obtemos uma equação discreta para os autovalores,

$$(E - \varepsilon_i) |i\rangle = V_{ij} |i-1\rangle + V_{ij} |i+1\rangle. \quad (2.8)$$

Observamos que as estruturas das equações (2.4) e (2.8) são idênticas. Nesse caso, estaremos simulando o nosso problema real com um modelo TB desde que

$$V_{ij} = \frac{\hbar^2}{2m^*a^2}. \quad (2.9)$$

A utilização da descrição TB é apropriada ao estudo do problema já que queremos um modelo Hamiltoniano quantizado e não casos clássicos e semi-clássicos comuns na literatura para o tratamento desse problema. As vantagens de uma descrição TB para o problema são as seguintes:

- Não é complicado nesse formalismo introduzir a super periodicidade com a adição de átomos/sítios de outro tipo.

- Dado o ítem acima, a variação dos sítios tipo-coluna é simples e mesmo introduzir “defeitos/desordem” pode ser feito.
- É conveniente para tratar a inclusão de campo magnético via substituição de Peierls.
- A base localizada $\sum_i c_i |i\rangle$ é extremamente conveniente para analisar densidade de probabilidade e densidade de corrente.
- Confinando um certo número de sítios/células unitárias pode-se estudar efeitos de tamanho, estados laterais, contatos, etc.

2.2 Rede Quadrada de Orbitais Tipo s

O modelo TB tem sido exaustivamente estudado e utilizado em situações artificiais, como por exemplo, cadeias unidimensionais de átomos. Tratam-se de simplificações necessárias para abordar efeitos complicados como – exemplo maior – desordem. Esses estudos deixaram de ser abstratos com o advento de sistemas reais de dimensionalidade reduzida como cadeias de polímeros. No presente trabalho deveremos lidar com o problema em duas dimensões.

Estudamos um modelo de cristal bidimensional com dois ou mais tipos de átomos dispostos periodicamente numa rede quadrada de parâmetro de rede “ a ”. O Hamiltoniano para essa rede é escrito como (todos os átomos-sítios-iguais):

$$H = \sum_{n,m} [\epsilon_{n,m} |n, m\rangle \langle n, m| + V_{n,m} (|n, m\rangle \langle n+1, m| + |n, m\rangle \langle n-1, m| + |n, m\rangle \langle n, m+1| + |n, m\rangle \langle n, m-1|)] . \quad (2.10)$$

A função de onda para esse sistema é:

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{n,m} e^{ik_x n} e^{ik_y m} |n, m\rangle . \quad (2.11)$$

Resolvendo a equação de Schrödinger temos:

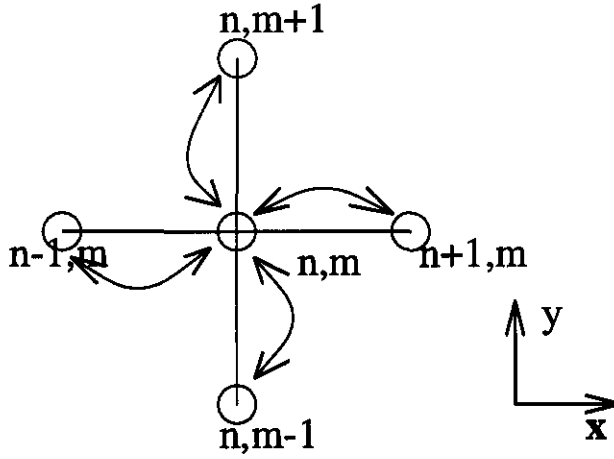


Figura 2.1: Representação da interação entre sítios los. vizinhos em uma rede bidimensional.

$$\sum_{n,m} \{[(\varepsilon_{n,m} - E_{\mathbf{k}}) |n, m\rangle \langle n, m| + V_{n,m} (|n, m\rangle \langle n+1, m| + |n, m\rangle \langle n-1, m| + |n, m\rangle \langle n, m+1| + |n, m\rangle \langle n, m-1|)]\} e^{ik_x n} e^{ik_y m} = 0. \quad (2.12)$$

Os elementos de matriz (matriz a ser diagonalizada) são obtidos via

$$\langle \Psi_{\mathbf{k}} | H - E_{\mathbf{k}} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle = 0, \quad (2.13)$$

com

$$\langle \Psi_{\mathbf{k}} | = \sum_{n,m} e^{-ik_x n} e^{-ik_y m} \langle n, m |, \quad (2.14)$$

e a condição de ortogonalidade dada por

$$\langle n, m | n', m' \rangle = \delta_{nm, n'm'}. \quad (2.15)$$

O fechamento da equação (2.13) fornece:

$$\sum_{nm} [(\varepsilon_{nm} - E_{\mathbf{k}}) + V_{n,n-1,m} e^{ik_x a} + V_{n,n+1,m} e^{-ik_x a}$$

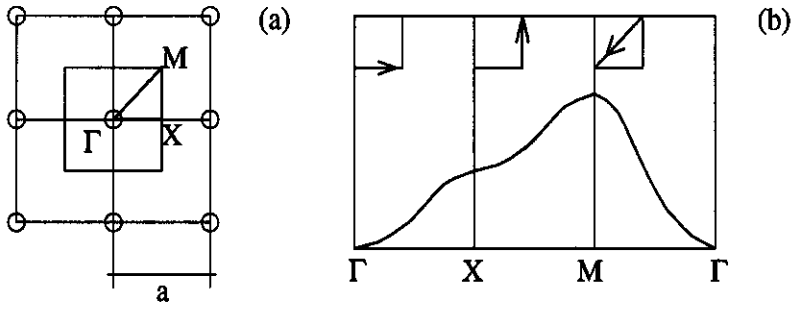


Figura 2.2: (a) Representação esquemática de uma célula unitária formada por um único sítio mostrando as direções utilizadas no cálculo da relação de dispersão. (b) Relação de dispersão para o caso $E_{\mathbf{k}} = 2V_0 \cos k_x a + 2V_0 \cos k_y a$

$$+V_{n,n,m-1,m}e^{ik_y a} + V_{n,n,m+1,m}e^{-ik_y a}] = 0, \quad (2.16)$$

onde n e m são índices dos sítios. No caso da rede homogênea, os elementos de “hopping” são definidos todos iguais a V_0 :

$$V_{n,n-1,m,m} = V_{n,n+1,m,m} = V_{n,n,m-1,m} = V_{n,n,m+1,m} \equiv V_0. \quad (2.17)$$

Se utilizarmos um único sítio como célula unitária obteremos para a equação (2.16) a conhecida relação de dispersão para um cristal bidimensional na aproximação TB:

$$E_{\mathbf{k}} = \varepsilon_0 + 2V_0 \cos k_x a + 2V_0 \cos k_y a. \quad (2.18)$$

Escolhemos uma célula unitária redundante de sítios hospedeiros. A super periodicidade devido à superrede lateral é introduzida por meio da modificação dos parâmetros de “hopping” para alguns sítios da rede hospedeira. Variamos a geometria da coluna de potencial da superrede lateral desde de um único sítio tipo coluna no centro da célula unitária até 13 sítios (formato tipo losango centralizado) Fig. 2.3b.

Em resumo, temos uma rede hospedeira de sítios com espaçamento a e uma célula unitária da super rede lateral formada de 5×5 ($a' = 5a$) desses sítios e a modulação superposta à esta última. Consideramos inicialmente o problema da estrutura eletrônica desses cristais

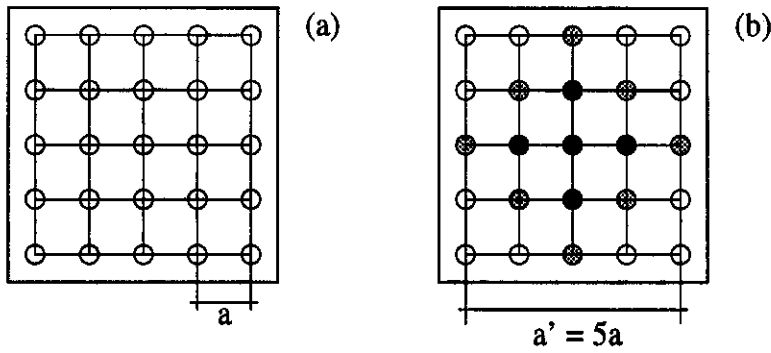


Figura 2.3: (a) Representação da célula unitária formada por 5 sítios utilizada na simulação. (b) Introdução dos sítios tipo coluna (barreiras). Círculos pretos: V_b . Círculos hachurados: $V_b/2$. Círculos brancos: rede hospedeira.

bidimensionais na ausência de campo magnético. No que segue apresentamos resultados para a geometria de modulação de potencial da 2.3b

Para efeitos de cálculo, os parâmetros considerados são a energia dos orbitais atômicos, ε_0 e o parâmetro de “hopping” entre vizinhos mais próximos $V_{n,m} = -\varepsilon_0/4$, onde n e m são índices dos sítios para a rede hospedeira descrevendo a situação de rede vazia (sistema não modulado). A ligação entre esse sistema e o de elétrons bidimensionais na aproximação de massa efetiva é efetuado via a seguinte parametrização: $V_{n,m} = -\hbar^2/2m^*a^2$, m^* = massa efetiva do elétron no fundo da banda de condução do GaAs = $0.067m_e$, $a = 20 \text{ \AA}$ ($a' = 5a = 100 \text{ \AA}$). Assim, $V_{n,m} = -0.142 \text{ eV}$ ($\varepsilon_0 = -4V_0 = 0.568656 \text{ eV}$). A modulação de potencial é introduzida simplesmente trocando-se os parâmetros de “hopping” $V'_{n,m}$ para os sítios descrevendo as colunas (“antidots”), conforme Fig. 2.3(b).

As energias dos orbitais atômicos são mantidas constantes para todos os sítios. A intensidade da modulação, ou a altura da barreira na região dos “antidots”, V_b , está relacionada ao parâmetro de hopping da seguinte forma: $V'_{n,m} = -(\varepsilon_0 - V_b)/4$. O fato de utilizarmos o “hopping” e não as auto-energias dos orbitais atômicos dos sítios como forma de variar o perfil da modulação se deve apenas a facilidades computacionais e não acarreta diferenças nos resultados, embora não seja um procedimento inerentemente físico.

De acordo com a figura 2.3b consideramos uma variação menos abrupta da modulação,

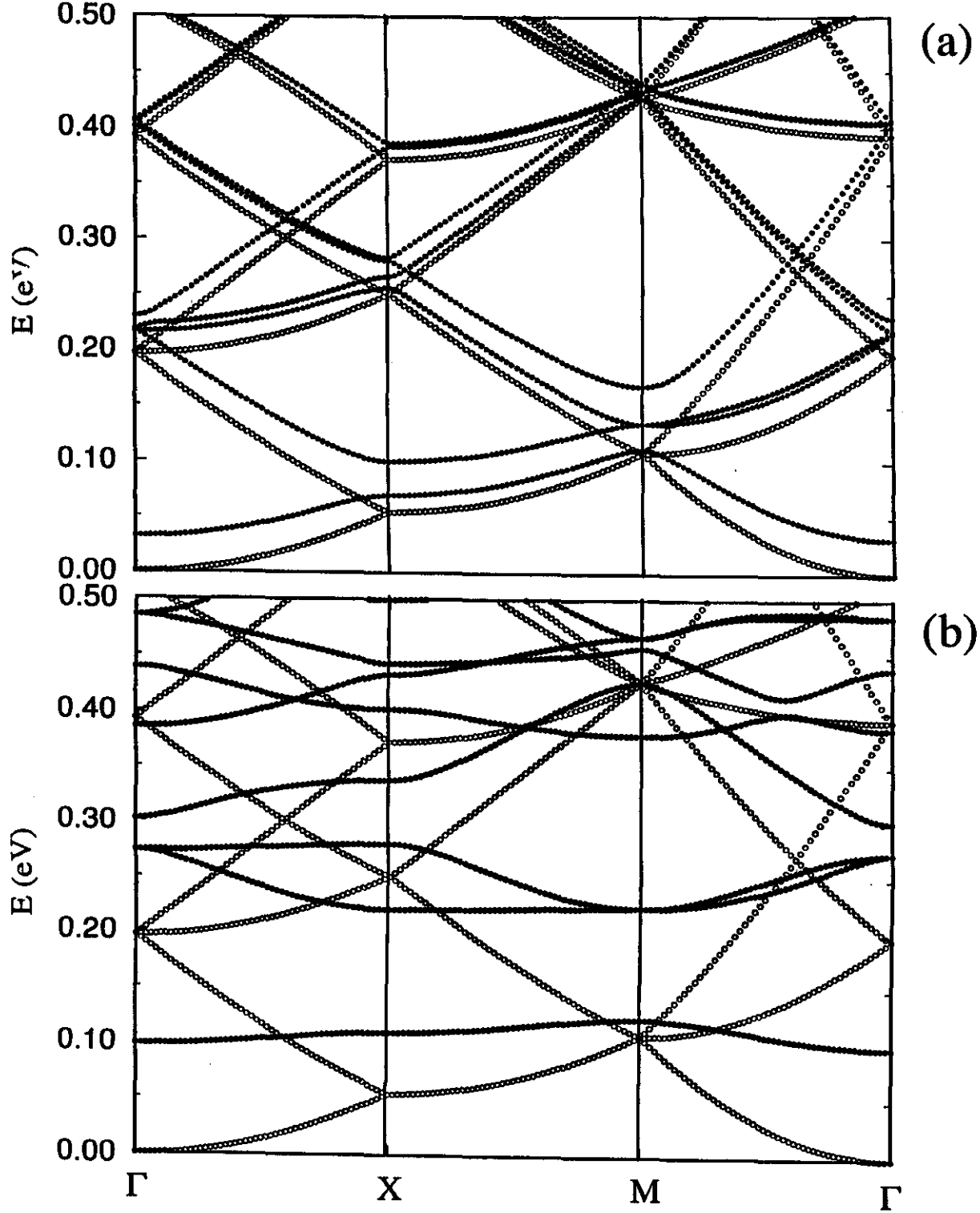


Figura 2.4: Relação de dispersão para os casos: (a) modulação fraca, $V_b = 0.10$ eV e (b) modulação forte, $V_b = 0.50$ eV – círculos pretos em ambos os casos. Os sítios brancos em (a) e (b) representam o caso rede vazia (sem modulação).

i. e, há sítios intermediários representando uma barreira intermediária de altura $V''_{n,m} = -(\epsilon_0 - V'_b)/4$, com $V'_b = 0.5V_b$. Com estes parâmetros podemos introduzir modulações de até $V_b = 0.568686$ eV, varrendo desde a configuração de rede vazia ($V_b = 0.0$ eV) até uma rede de “quantum dots” isolados ($V_b = \epsilon_0$). O modelo compara bem com caso da literatura para as relações de dispersão eletrônica de antidots cilíndricos calculados via o método “Augmented Plane Wave” (APW) [31]. Voltando novamente ao caso da figura 2.4, comparamos três casos de dispersão eletrônica: (a) rede vazia (círculos brancos) e $V_b = 0.10$ eV, círculos pretos, modulação fraca; (b) modulação forte, $V_b = 0.50$ eV também comparados com a rede vazia base de círculos brancos. No caso (b) temos uma rede de “quantum dots” acoplados (círculos pretos) para energias abaixo de V'_b , como pode ser observado nas três bandas mais baixas.

2.3 Inclusão de B

2.3.1 Substituição de Peierls

Peierls (1933) [32] estudando as propriedades diamagnéticas de elétrons fortemente ligados em metais foi o primeiro a substituir o índice de Bloch $\mathbf{k}$ pelo operador $(\mathbf{p} - e\mathbf{A})/\hbar$, $\mathbf{A}$ o vetor potencial, na dispersão $\epsilon_{\mathbf{k}}$. Os primeiros passos no sentido de se justificar a hipótese de Peierls vieram do estudo de elétrons em um potencial periódico perturbado [33, 34]. As autoenergias permitidas E do problema perturbado são dadas aproximadamente resolvendo-se a equação [35]:

$$\{E_0(-i\hbar\nabla) + e\varphi(\mathbf{r})\} \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (2.19)$$

onde $e\varphi(\mathbf{r})$ = potencial perturbador e $-i\hbar\nabla = \mathbf{p}$. Luttinger [35] mostrou que no caso da substituição de Peierls para o Hamiltoniano (2.19) não apareciam termos extras sendo os níveis de energia na presença de campo magnético dados por

$$\{E_0[-ie\nabla - e\mathbf{A}] + e\varphi\} \Psi = E\Psi. \quad (2.20)$$

O passo seguinte foi a obtenção de um Hamiltoniano efetivo que lidasse com o problema de elétrons de Bloch sujeitos a campo magnético. Kohn [36] mostrou que o Hamiltoniano para elétrons de Bloch sujeitos a campo magnético era de fato escrito como uma função de $H(\hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A})$. Blount [37] simplificou o método de Kohn para os formalismos de Schrödinger, Pauli e Dirac, sendo sua derivação válida para simetrias arbitrárias.

Estes tratamentos foram refinados com a definição ([38] e referências dentro) de operadores de translação magnética (OTM) que comutam com o Hamiltoniano efetivo do problema, (procedimento adotado neste trabalho – Apêndice A) culminando na equação de Harper: Hamiltoniano tight-binding de banda única, forte modulação do potencial, campo magnético perpendicular ao plano de cargas. Hofstadter mostrou que esta equação exhibe comportamento auto-similar para campos magnéticos extremamente grandes [13, 20].

2.3.2 Aplicação da Hipótese de Peierls

Efeitos de campo magnético são obtidos então com a inclusão da dependência de campo magnético via substituição de Peierls, onde $\hbar\mathbf{k} \rightarrow \hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A}$, no Hamiltoniano TB. Para simplificar escolhemos o calibre de Landau para o campo perpendicular ao plano do cristal 2D: $\mathbf{A} = (0, naB, 0)$. Nesse caso, H agora é escrito como:

$$H = \sum_{n,m} \left[|n, m\rangle \varepsilon_0 \langle n, m| - V_{n,m} \left(|n, m\rangle e^{i2\pi\phi/\phi_0 m} \langle n, m+1| + |n, m\rangle \langle n+1, m| + \text{Hc} \right) \right], \quad (2.21)$$

onde ϕ/ϕ_0 é o fluxo magnético Ba^2 em unidades de quanta de fluxo h/e .

As colunas de potencial, isto é, os sítios tipo coluna e os sítios hospedeiros são periódicos em ambas as direções do plano:

$$V(n \pm a, m) = V(n, m \pm a) = V(n, m). \quad (2.22)$$

Aqui cabe salientar que o sistema plano de cargas é invariante sob translações tanto na direção n quanto na direção m , entretanto o Hamiltoniano não é invariante sob estas translações. A razão para isto é a presença do vetor potencial $\mathbf{A}$, apesar do campo magnético

ser uniforme. Assim, escolhe-se um operador de translação magnético que comute com o Hamiltoniano

$$[T_R, H] = 0. \quad (2.23)$$

Seguindo tratamentos encontrados na literatura [39, 40] e Apêndice A, a função de onda com o campo embutido fica:

$$\tilde{\Psi}_{\mathbf{k}} = \sum_{n,m} \tilde{T}_{n,m} |n, m\rangle, \quad (2.24)$$

com

$$\tilde{T}_{n,m} = e^{ik_x n} e^{ik_y m} e^{i2\pi\phi/\phi_0 n}. \quad (2.25)$$

Resolvemos novamente o problema

$$H\tilde{\Psi}_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}\tilde{\Psi}_{\mathbf{k}}, \quad (2.26)$$

obtendo autovalores que diagonalizam simultaneamente $\tilde{T}_R$ e H .

Na simulação desenvolvida, o fluxo magnético é definido relativo à célula hospedeira com parâmetro de rede a . A célula unitária escolhida inicialmente para o sistema modulado tem parâmetro de rede $a' = 5a$. Na ausência de campo magnético as relações de dispersão são funções de $\mathbf{k}' = \mathbf{k}/n$. Na presença de campo magnético a solução do Hamiltoniano (2.21) é uma generalização do problema original de Hofstadter [13].

De fato a introdução do campo magnético via substituição de Peierls acrescenta um termo na fase da função de onda dependente de B . Isso modifica a forma como os elétrons vão “enxergar” a rede, introduzindo um problema de comensurabilidade. Estes novos *elétrons de Bloch magnéticos* são soluções para o problema para determinados valores de $\phi/\phi_0 = p/q$, p e q inteiros. Assim, ao aumentarmos o valor de q , estaremos aumentando o tamanho da célula unitária, $qa = ma'$ [39]. A periodicidade imposta pelo campo é restaurada para este particular valor de q .

No caso ilustrado na figura 2.5, $q=15$ para $n=5$ e $m=3$, ou seja, temos três células unitárias referentes à modulação com parâmetro de rede $a' = 5a$, formadas por 25 sítios cada

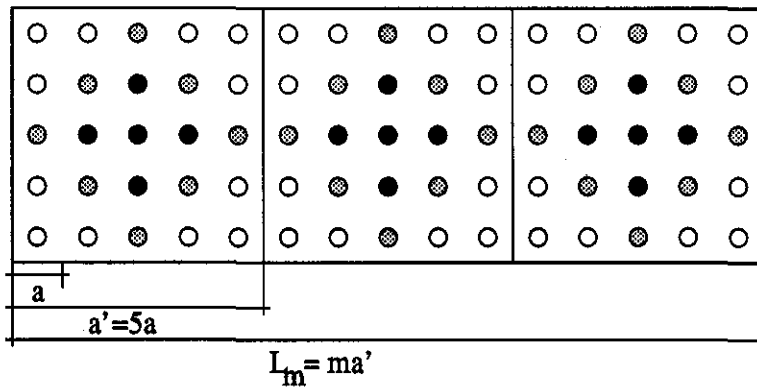


Figura 2.5: Representação esquemática da célula uniária da super rede lateral com parâmetro de rede a' . Círculos pretos e cinzas representam os sítios tipo coluna os quais descrevem, respectivamente, barreiras mais altas e barreiras intermediárias relativas à rede hospedeira (círculos brancos).

e que devido justamente ao campo magnético ($q'=3$) irão se repetir somente de 3 em 3 células unitárias da super rede lateral.

2.4 Efeitos de Modulação

Com o Hamiltoniano modificado, incluindo campo magnético e já tendo como variar a intensidade da modulação, analisamos o espectro eletrônico das redes de “antidots” (“dots”). Relembramos que os casos aqui estudados são para antidots de separação de $100 \text{ \AA}$. ($n = 5$ e $a = 20 \text{ \AA}$). Comparando com resultados experimentais obtidos [27] os parâmetros utilizados estão uma ordem de magnitude abaixo dos parâmetros de rede e densidade de portadores do atual “estado da arte” das super redes laterais. Entretanto, os principais resultados são qualitativamente independentes das dimensões espaciais.

Na figura 2.6 mostramos o espectro eletrônico de super redes laterais, com diferentes intensidades de modulação, em função do fluxo magnético. Na figura 2.6a não há modulação e obtivemos a borboleta de Hofstadter da rede hospedeira, conforme esperado. Aqui e nos demais casos nos concentraremos em mostrar somente um quarto do espectro. Há soluções somente para $\phi/\phi_0 = p/q$, onde p e q são inteiros. Claramente vemos que para $\phi/\phi_0 = p/q$

temos q bandas no espectro. O Espectro completo é periódico com respeito a ϕ/ϕ_0 , com período 1 e é simétrico com respeito ao fluxo magnético. Esta propriedade é observada trocando-se p/q por $1 - p/q$. Todo o espectro de energia também é simétrico com relação ao centro de banda ε_0 da rede hospedeira. Estas considerações reúnem as propriedades da figura original da “Borboleta de Hofstadter” as quais irão ser importantes no que segue.

A análise dos efeitos da superrede lateral é limitada ao limite contínuo do espectro da rede hospedeira, isot é, bandas mais baixas e valores de $\phi/\phi_0 \leq 0.2$ [41]. Isto não acrescentou maiores dificuldades à situação exposta acima. O limite contínuo é bem definido para $\phi/\phi_0 = 0.05$, onde pelo menos 5 níveis de Landau sem dispersão são identificados, os quais caracterizam efeitos de campo magnético em um sistema homogêneo. Já que estamos interessados em superredes laterais, a dimensão relevante irá ser a célula unitária desta superrede, a qual possui área 25 vezes a área da célula unitária da rede hospedeira, conforme explicado no início deste capítulo. Com estes valores em mente, $\phi/\phi_0 = 0.05$ representa um fluxo de até $\phi'/\phi_0 = 1.25$ na célula unitária da superrede lateral. ✱

Outro aspecto interessante é que $\phi/\phi_0 = 1$ equivale a um campo magnético $B \approx 1031$ T, considerando a massa efetiva e os parâmetros da rede hospedeira utilizados. Embora seja um limite pouco realista, estamos interessados no limite contínuo para a rede hospedeira, $\phi/\phi_0 \leq 0.05$ voltando para campos magnéticos $B \leq 50$ T. Enfatizamos aqui novamente que – conforme parâmetros utilizados na simulação – estamos a pelo menos uma ordem de grandeza distante de uma possível comparação com resultados experimentais atuais [42, 18]. Porém os principais resultados obtidos neste capítulo mostram-se qualitativamente independente dos valores de campo magnéticos absolutos.

“Ligamos” então a modulação de potencial. Na figura 2.6b vemos o espectro eletrônico como uma função de ϕ/ϕ_0 , onde os cinco sítios centrais da região do “antidot” representam uma barreira de $V_b = 100$ meV, enquanto os periféricos simulam uma barreira de $V_b = 50$ meV. Claramente notamos uma forte dispersão nos níveis de Landau, mas a borboleta original de Hofstadter ainda pode ser reconhecida considerando-se a variação total de fluxo magnético, conforme figura 2.6b. Aumentando-se a intensidade da modulação, figura 2.6c, para até $V_b = 0.50$ eV ($V'_b = 0.25$ eV), atingimos o limite do regime de modulação

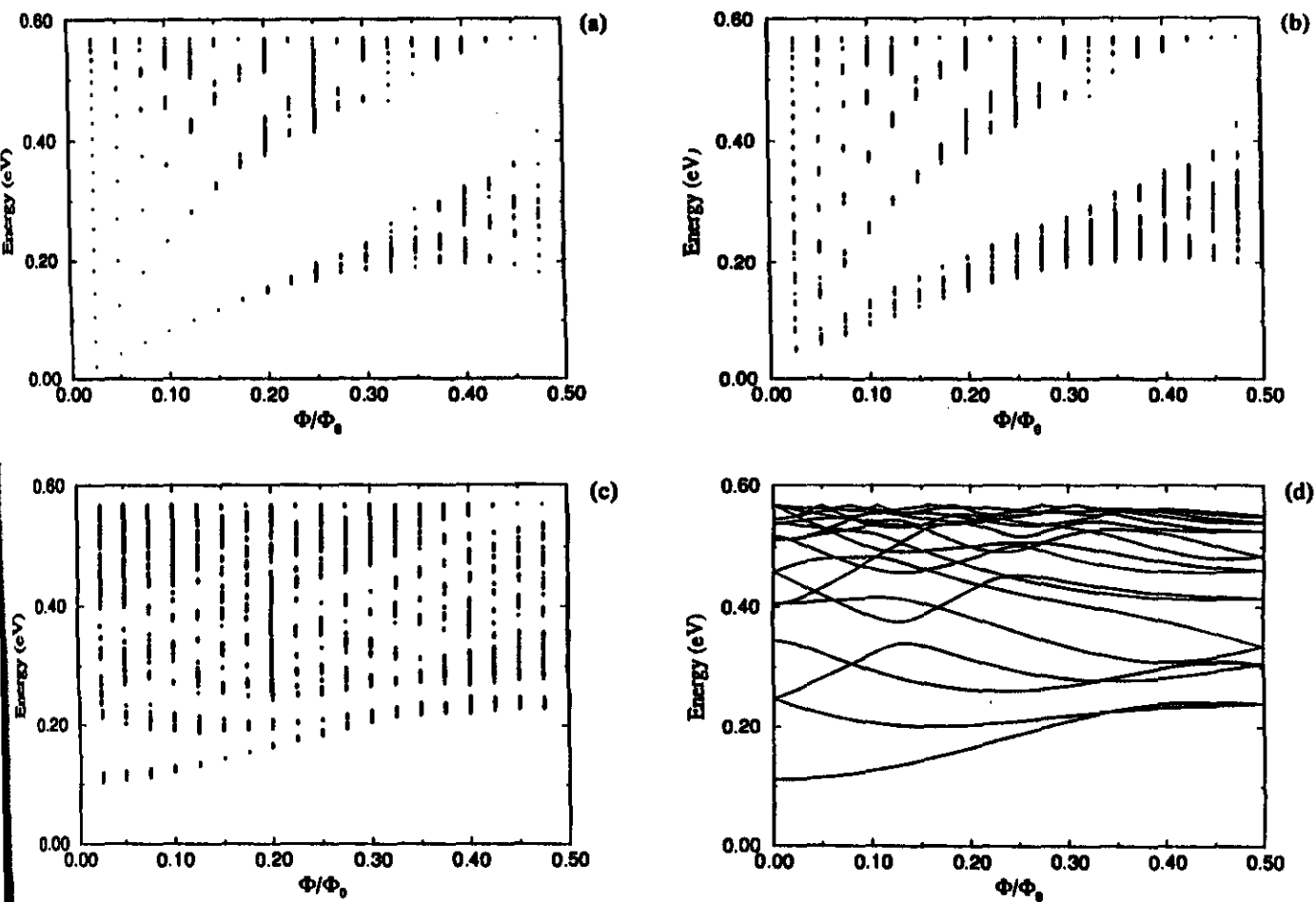


Figura 2.6: Espectro eletrônico para super redes laterais em função do fluxo magnético. (a) rede hospedeira, (b) modulação de potencial fraca, (c) forte modulação de potencial, e (d) rede de "quantum dots" isolados [M. A. Andrade Neto and P. A. Schulz, Phys. Rev. B 52 14 093 (1995).].

forte. Agora a estrutura eletrônica mostra bandas que evoluem com campo magnético tipo estados de um “quantum dot isolado”, figura 2.6d. Pode-se identificar com facilidade aqui a formação dos primeiros níveis de Landau do “bulk” (volume) com o aumento do campo magnético, bem como os estados laterais mais baixos do “dot”.

Para valores elevados do fluxo magnético, quando o comprimento magnético é comparável ao parâmetro da rede hospedeira, este comportamento começa a mudar, assemelhando-se a figura de Hofstadter. Esta situação também implica o limite contínuo para o caso de modulação forte. Agora este limite é ainda mais confortável do que no caso de modulação fraca, e para $\phi/\phi_0 \leq 0.2$ não existem desdobramentos em subbandas devidos à rede hospedeira base.

No caso da modulação fraca, figura 2.6b, a modulação de potencial leva a uma dispersão nos primeiros níveis de Landau do sistema homogêneo e ao mesmo tempo estas bandas de Landau se acoplam. No caso da modulação forte, figura 2.6c, o campo magnético muda o espectro eletrônico para um sistema de dots acoplados. Estes dois limites representam os bem conhecidos regime de Landau e regime de Önsager, respectivamente [43]. Antes de discutir o regime intermediário de colapso [43], o proximo passo é analisar a estrutura interna das bandas de Landau no caso da modulação fraca, bem como no sistema de “quantum dots” acoplados ou caso da modulação forte.

Na figura 2.7a temos um espectro escalado da banda de Landau mais baixa, para valores pequenos do fluxo magnético, de uma superrede lateral com amplitude de modulação de $V_b = 10$ meV e $V'_b = 5$ meV. O fator de escala é utilizado somente para reduzir a dispersão do espectro para visualizar melhor a figura. Esta modulação é bem mais fraca do que o representado na figura 2.6b, para o qual as bandas de Landau já se apresentavam fortemente misturadas mesmo em valores pequenos de fluxo magnético. Pode-se observar que esta banda apresenta um espectro do tipo Hofstadter. Nota-se que $\phi/\phi_0 = 0.04$ na figura corresponde a $\phi'/\phi_0 = 1$ para a célula unitária da superrede lateral; $\phi/\phi_0 = 0.5$ para $\phi'/\phi_0 = 5/4$, $\phi/\phi_0 = 0.06$ para $\phi'/\phi_0 = 3/2$ e assim por diante, de acordo com a escala das células unitárias da rede hospedeira e da superrede lateral. Com isso em mente, observamos que o número de bandas interiores para um dado valor de ϕ'/ϕ_0 é proporcional a p da fração

p/q . Em outras palavras, o espectro de Hofstadter é aqui uma função do inverso do fluxo magnético [14, 44]. Isto é exatamente o que deveríamos esperar para a estrutura de níveis de Landau em um potencial periódico fraco, conforme recentemente calculado [14, 45, 46], em oposição ao modelo TB bidimensional de banda única representado pelo caso da rede hospedeira da figura 2.2b. O acoplamento entre as bandas de Landau é evidenciado pela abertura do “gap” entre as duas bandas para $\phi'/\phi_0 = 2$ ($\phi/\phi_0 = 0.08$ na figura).

Por outro lado, na figura 2.7b a estrutura interna de uma estrutura tipo “quantum-dot” mostra uma borboleta de Hofstadter como função direta do fluxo magnético, característica de forte modulação de potencial. De fato, olhando novamente a figura 2.4b a banda inferior do sistema fortemente modulado se aproxima razoavelmente bem do caso TB de banda única. O comportamento geral do espectro de uma rede de quantum dots já foi obtido na literatura [47] considerando o caso de modulação fraca. Entretanto, não foi feito uma varredura fina da estrutura interna das bandas.

O “crossover” entre as regiões de modulação fraca e modulação forte é caracterizado por esta transição da borboleta de Hofstadter, como uma função do inverso do fluxo magnético a um espectro similar como função direta do fluxo magnético. Este espectro de Hofstadter refere-se a estrutura interna das primeiras bandas na nossa superrede lateral. Este fenômeno pode ser melhor visualizado com ajuda da Fig. 4, onde o espectro eletrônico da superrede lateral, para um valor fixo de $\phi/\phi_0 = 0.05$ ($\phi'/\phi_0 = 5/4$) é representado como uma função da intensidade de modulação de potencial, V_b , com $V'_b = V_b/2$. Para este valor de fluxo magnético, no regime de Landau a estrutura interna de cada banda de Landau mostra cinco bandas internas, enquanto que no regime de Önsager apenas quatro. Observamos que a banda mais alta da estrutura interna de cada banda de Landau para o limite de modulação fraca é dividida na direção da respectiva banda superior conforme a intensidade da modulação aumenta. É evidente que na região do “crossover”, apesar de ainda existir um espectro auto-similar, borboletas altamente distorcidas irão tocar uma na outra. Este sobre cruzamento ocorre na faixa em que a energia de quantização de Landau (em nosso caso $\phi/\phi_0 = 0.05$ corresponde a $\hbar\omega_c = 89$ meV) é da ordem da modulação de potencial. A faixa equivalente ao regime de “crossover” é bem larga e deve ser fortemente dependente do perfil da modulação

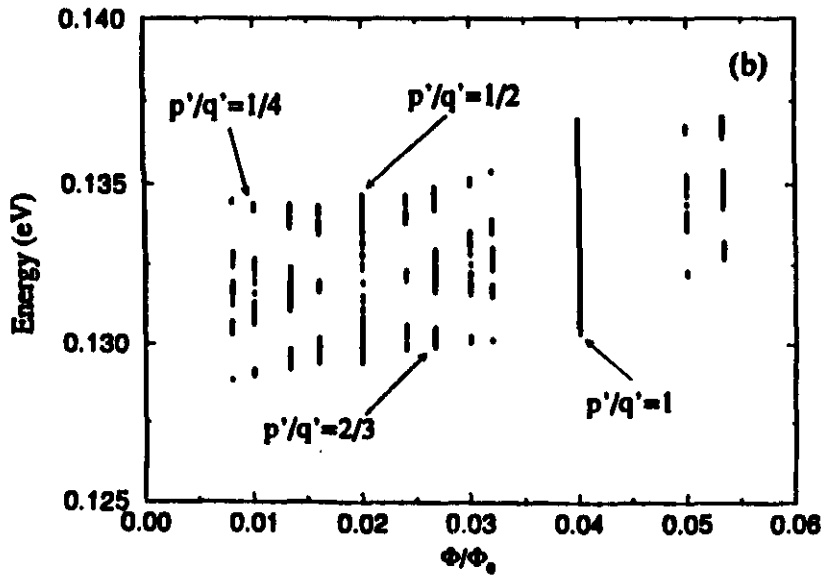
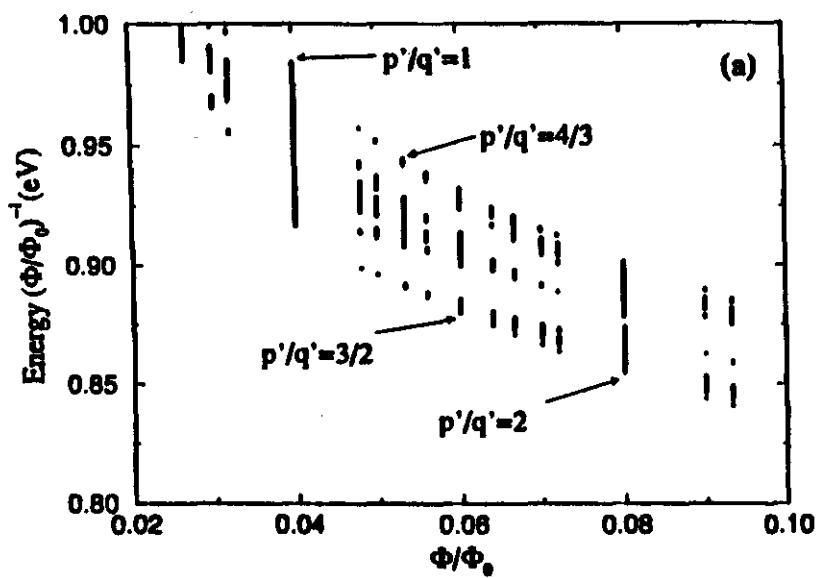


Figura 2.7: Espectro de energia em função do fluxo magnético para a banda mais baixa em dois limites. (a) Super rede lateral com fraca modulação de potencial. A energia é escalada pelo número de fluxo magnético em uma célula unitária da rede hospedeira no sentido de obter melhor visualização. (b) Super rede lateral fortemente modulada. Parâmetros utilizados na figura são encontrados no texto. Em ambas as figuras os eixos horizontais indicam a variação do fluxo magnético, ϕ/ϕ_0 , através da célula unitária hospedeira. Alguns valores do fluxo magnético através da super rede lateral, $\phi'/\phi_0 = p'/q'$, são indicados nas figuras.

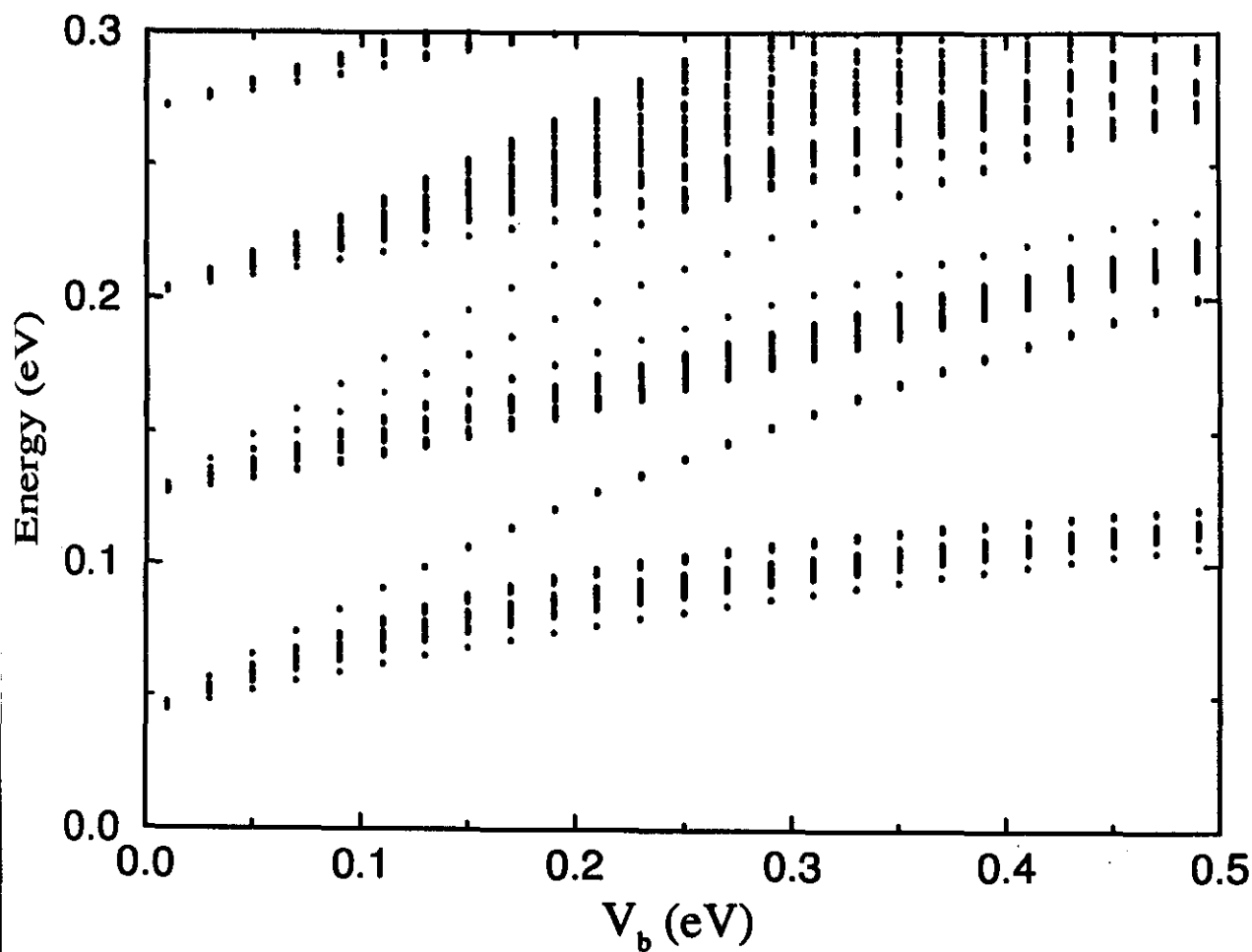


Figura 2.8: Espectro eletrônico para uma superrede lateral em função da modulação de potencial para um valor fixo de $\phi/\phi_0 = 0.05$.

de potencial. Notamos também que, aumentando V_b , o “gap” intermediário é estreitado aproximando-se do limite do espectro de uma banda desacoplada [45].

Os principais resultados desse capítulo podem ser resumidos no que segue:

- desenvolvemos um modelo que mostra, na mesma estrutura, a evolução do espectro eletrônico de super redes laterais em função do campo magnético (perpendicular) variando-se a modulação de potencial de fraca a forte,
- o espectro do tipo-Hofstadter, para as bandas mais baixas, pode ser identificado em qualquer regime de modulação,
- o enfoque utilizado tornou possível observar, pela primeira vez, a passagem do limite de modulação fraca (regime de Landau) para o limite de modulação forte (regime de Önsager), pelo menos para as primeiras bandas da estrutura eletrônica desses sistemas periódicos.

Baseados no comportamento geral do espectro eletrônico visto aqui, podemos inferir que nossos resultados principais são qualitativamente independentes da distância real dos “antidots”, bem como do tamanho da base (número de sítios da célula unitária da superrede lateral) para descrever o plano homogêneo (sem modulação) e também da intensidade de campo magnético. Os parâmetros usados $a' = 100 \text{ Å}$ e modulação de até $V_b = 0.5 \text{ eV}$ podem ser mudados para $a' \approx 1000 \text{ Å}$ e $V_b = 1.0 \text{ eV}$ a um custo computacional razoável. Aumentando o número de sítios que descrevem a célula unitária da superrede lateral ampliamos a faixa de descrição do perfil de potencial tornando possível aproximar às condições experimentais para observação destes efeitos. Isto será abordado no capítulo 4.

Capítulo 3

Sistemas Confinados: Estados Laterais e de Volume

Estados de borda são fundamentais na interpretação de magnetotransporte no regime do efeito Hall quântico. Essa importância motivou o estudo das propriedades destes estados em sistemas mesoscópicos e um dos fenômenos de maior apelo acadêmico é a manifestação de oscilações de Aharonov-Bohm nesses sistemas.

No contexto do presente trabalho a natureza desses estados são interessantes já que uma rede de “antidots” pode ter dimensões arbitrárias, definidas no processo de fabricação. Em outras palavras, a razão “volume”/superfície é variável de amostra para amostra. A primeira questão que se apresenta é sobre o tamanho mínimo de um cristal 2D artificial, para que características de autosimilaridade do espectro de energia, discutidos no capítulo anterior, se manifestem [45].

Uma questão complementar que deve ser investigada diz respeito à natureza dos estados laterais em si, bem como sobre o acoplamento destes com os estados de “bulk”¹.

¹em geral utilizaremos o termo “bulk” em conformidade com a literatura ao invés de “volume” exceto em situações que o último seja conveniente

3.1 Breve Histórico

Estudos teóricos de elétrons sujeitos a campo magnético e a um potencial periódico têm de fato uma longa história [48, 49]. Para o caso de um único “antidot” confinado, estados laterais foram estudados como correções paramagnéticas ao diamagnetismo de Landau [50, 51, 52, 53], efeitos de interação elétron-elétron em “dots” parabólicos [54, 55] e correspondência entre resultados quânticos e órbitas ciclotrônicas clássicas foram analisados [56]. Estes sistemas, elétrons isolados confinados em uma, duas ou três dimensões, os assim chamados “quantum dots”, são de uma maneira geral bem entendidos [57].

Se as condições experimentais são tais que as barreiras entre “dots” adjacentes tornam-se menores e eles se acoplam, um comportamento mais rico é observado [58]. No caso de um potencial repulsivo emulando uma coluna rígida, um “antidot”, também aparece comportamento complexo [59]. Para estruturas fracamente moduladas, que tem sido as estruturas mais consideradas nestes estudos, o espectro de energia apresenta sinais da borboleta de Hofstadter [13] no limite quântico [42]. Os últimos casos, cuja introdução mais detalhada pode ser encontrada no cap. 1 e referências, são conhecidos na literatura como redes de “antidots” e têm atraído a atenção de muitos pesquisadores não somente pela possibilidade de fabricação e aplicação de tais dispositivos na indústria – o confinamento dos portadores reduz o espalhamento o que resulta em transistores de alta mobilidade – mas porque neste regime, a dimensão do parâmetro de rede da rede de “antidots” torna-se comparável com o comprimento de onda do elétron e o transporte de carga passa a ser dominado pelas propriedades quânticas fundamentais do elétron [60].

Entretanto quase todo trabalho experimental e a grande maioria dos estudos teóricos em gases de elétrons bidimensionais sujeitos a potenciais periódicos e campo magnético tem sido realizados em estruturas essencialmente macroscópicas e dentro destes estudos os principais esforços se concentram nas propriedades de magnetotransporte. O regime quântico utilizando uma descrição tight-binding (TB) foi estudado só recentemente para o caso de magnetotransporte quântico [21] e para variação arbitrária da intensidade da modulação no qual o espectro de Hofstadter está presente em qualquer regime de modulação [25] (cap. 2).

3.2 Modelo Utilizado

O nosso ponto de partida será uma caixa quântica quadrada de sítios hospedeiros na presença de um campo magnético perpendicular ao plano. Dentro desse “quantum dot” será introduzida a modulação de potencial com o mesmo perfil utilizado para o cristal artificial infinito discutido no capítulo 2. Também como no cap. 2, o modelo aqui desenvolvido para descrever a rede de “antidots” na presença de campo magnético é o TB. Na ausência de modulação, esse sistema é equivalente ao estudado por Sivan e colaboradores [61], com resultados qualitativamente equivalentes ao caso de uma caixa circular, discutida por Lent [56]. O modelo TB revelou-se, ao longo deste trabalho, uma receita numérica poderosa para simular as bandas mais baixas de um sistema eletrônico bidimensional descrito na aproximação de massa efetiva. A limitação do modelo para descrever somente as bandas mais baixas do sistema ainda propicia um desafio experimental no sentido de atingir esta condição. Como no cap. 2, ainda somos capazes de variar “continuamente” a intensidade da modulação de potencial em ambas as direções do plano. A diferença aqui em relação ao modelo do cap. 2 é que confinamos um certo número de células unitárias em uma caixa de paredes rígidas. Esta caixa é formada de n por n sítios da rede hospedeira. Agora não temos mais bons números quânticos como k_x e k_y pois o sistema é finito.

O Hamiltoniano para este sistema é

$$H = \sum_{\substack{n=1, n_0 \\ m=1, m_0}} \left(|n, m\rangle \epsilon_0 \langle n, m| - V_{n,m} \left[|n, m\rangle e^{i2\pi\phi/\phi_0} \langle n, m+1| + |n, m\rangle \langle n+1, m| + \text{H.c.} \right] \right). \quad (3.1)$$

Os parâmetros utilizados são os mesmos do cap. 2: ϵ_0 é a energia do orbital atômico e $V_{n,m} \equiv V_0 = -\epsilon_0/4$, o elemento de “hopping” entre vizinhos mais próximos, onde n e m são índices dos sítios para a rede hospedeira descrevendo o limite de rede vazia (sistema não modulado). O efeito do campo magnético é incluído no termo do fator de fase da equação através da já conhecida substituição de Peierls [32] e escolhemos novamente o calibre de Landau, $\mathbf{A} = (0, naB, 0)$. ϕ/ϕ_0 é o fluxo magnético Ba^2 em unidades de quanta de fluxo e/h . O fluxo magnético é definido relativo à célula unitária da rede hospedeira com parâmetro de

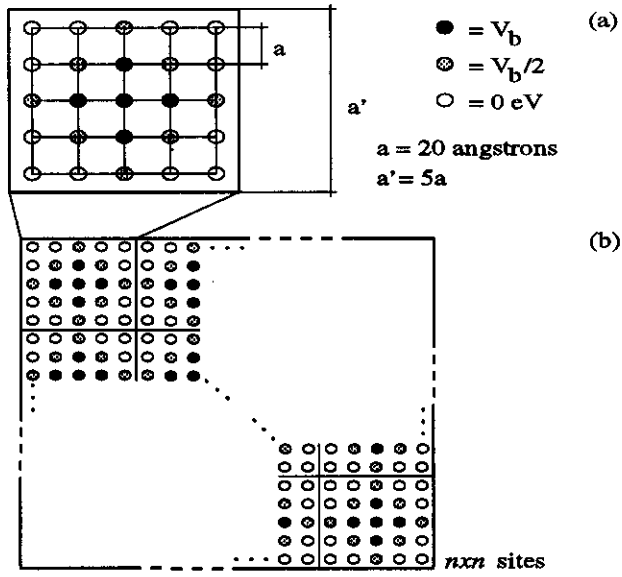


Figura 3.1: Representação esquemática da célula unitária e da caixa contendo nxn sítios da rede hospedeira.

rede a . Tanto o caso infinito apresentado no cap. 2 quanto o sistema confinado deste capítulo tem como característica comum o fato de possuírem soluções somente quando $\phi/\phi_0 = p/q$, onde p e q são inteiros. Para o caso finito (confinado) fixando um valor para o tamanho da caixa em termos do número de sítios da rede hospedeira não alteramos a faixa de valores que podemos atribuir a l' . Entretanto, para o caso infinito (não confinado, cap. 2) as condições de contorno são dadas por k_x e k_y , ou seja, segue-se o teorema de Bloch com uma nova periodicidade imposta agora pelo campo magnético. A célula unitária para o sistema confinado também tem um parâmetro de rede $a' = 5a$, ver Fig. 3.1. Como usual, o “link” entre o TB e a aproximação de massa efetiva é feito via a seguinte parametrização: $V_{n,m} = \hbar^2/2m^*a^2$.

Nossa intenção é de emular uma heteroestrutura de AlGaAs/GaAs, mais precisamente, um gás de elétrons não interagentes entre si que se forma na interface do GaAs sobre o qual é superposto uma rede de colunas de potencial, conforme ilustrações do capítulo 1. Assim, $m^* = 0.067m_0$, a massa efetiva do fundo da banda de condução do GaAs. $a = 20 \text{ \AA}$, $V_{n,m} = -0.142 \text{ eV}$ ($\epsilon_0 = 0.568 \text{ eV}$). Mudando-se os parâmetros de “hopping” para os

sítios descrevendo os “antidots” e teremos introduzido a modulação de potencial, conforme Fig. 3.1 enquanto as energias dos orbitais atômicos são mantidas constantes para todos os sítios. A altura da barreira na região do “antidot”, V_b , está relacionada aos elementos de “hopping” de acordo com $V'_{n,m} = (\epsilon_0 - V_b)/4$. Foi considerado, como no caso do cap. 2, uma “suavização” da modulação ao invés de uma variação abrupta do “antidot”, de acordo com a Fig. 3.1a. Os sítios intermediários representam uma barreira intermediária V'_b e está relacionado aos parâmetros de “hopping” como $V''_{n,m} = (\epsilon_0 - V'_b)/4$. Com esses parâmetros temos uma larga faixa de variação da modulação, que vai desde $V_b = 0$ até $V_b = \epsilon_0$, significando respectivamente rede vazia ($V_b = 0.0$ eV) a uma rede de “antidots” ($V_b = 0.568$ eV). Na simulação utilizamos $V'_b = V_b/2$. Na Fig. 3.1b temos uma representação esquemática de uma caixa contendo $n \times n$ sítios da rede hospedeira. Dentro da caixa “ligamos” então a modulação e passamos a ter $(n/5) \times (n/5)$ células unitárias da modulação.

Os demais procedimentos de cálculo são idênticos aos do cap. 2, sendo assim, passamos diretamente à análise do espectro eletrônico.

3.3 Discussão dos Resultados

Analisamos o espectro eletrônico da rede de “antidots” com a modulação de potencial igual a 0.5 eV e para uma separação entre os “antidots” de 100 Å ($n = 5$ e $a = 20$ Å). O maior caso confinado analisado foi uma caixa descrita por 35x35 sítios da rede hospedeira, ou seja, 7x7 células unitárias da modulação. O tamanho da região confinada (caixa) e principalmente o parâmetro de rede da célula unitária da modulação estão cerca de uma ordem de grandeza abaixo dos atualmente crescido em laboratório, mas representam um passo nessa direção. Além disso, a meta experimental é chegar cada vez mais próximo do regime quântico no sentido de observar o espectro de energia fractal, assim os resultados aqui mostrados são importantes, já que como no caso do sistema não confinado nossos resultados são qualitativamente independente das dimensões espaciais.

Na Fig. 3.2 plotamos os autovalores em função de ϕ/ϕ_0 para três tipos de caixas: (a) 5x5, (b) 15x15 e (c) 25x25 sítios da rede hospedeira, $V_b = 0.0$ eV. Podemos ver como

o espectro de energia evolui conforme aumentamos o tamanho da caixa descrita pela rede hospedeira.

Nas Figs. 3.2b e 3.2c identificamos quatro regiões distintas: região de regime de campo fraco – I –, região de níveis de Landau (estados de “bulk”) – II –, uma região não acessível aos estados do sistema (barreira magnética) – III – e a região dos estados laterais – IV –, de acordo com Sivan [61]. Na maior caixa, 25x25 sítios, os níveis de Landau são melhor resolvidos. Isto ocorre porque quando aumentamos o tamanho da caixa para um valor fixo do campo magnético, o número de estados que colapsam em níveis de Landau também aumenta.

A região IV que no caso não confinado é um “gap”, ver cap. 2, está agora preenchida por uma outra classe de estados. Estes são os estados laterais devido ao confinamento da caixa. Uma visão geral da Fig. 3.2c mostra similaridade com 1/4 do espectro da borboleta de Hofstadter, conforme esperado, já que para valores elevados de fluxo magnético a modulação devida a rede hospedeira começa a se manifestar.

Voltando brevemente à Fig. 3.1b temos uma caixa formada por $n \times n$ sítios da rede hospedeira. Quando “ligamos” a modulação de potencial temos a formação da rede de “antidots”, $(n/5) \times (n/5)$ células unitárias da modulação, formadas dentro da caixa. Podemos identificar ainda três tipos diferentes de “dots” também dentro da caixa. De fato, para o caso de modulação forte considerado aqui temos uma rede de “antidots”/“dots” dentro da caixa (uma estrutura do tipo caixa-de-ovo discretizada). Os “dots” formados dentro da estrutura são responsáveis pelas bandas de “bulk”, embora no caso de caixas pequenas eles estejam bem próximos da superfície. Os semi-“dots” formados nas laterais da caixa irão originar os estados laterais. Note que o tamanho da região de confinamento destes semi-“dots” é exatamente metade da área dos “dots” formados na região de “bulk”. Finalmente, há quatro pequenos “dots” nos cantos da caixa. Chamamos estes estados de “estados de canto”. Os estados de canto possuem, é claro, 1/4 da área dos “dots” da região do “bulk”.

A descrição logo acima é feita para facilitar a identificação das bandas que irão aparecer na análise do caso modulado que segue.

Começamos nossa análise da Fig. 3.3a com ajuda da Fig. 3.2a. Olhando com atenção para a primeira banda da Fig. 3.3a notamos que ela se comporta identicamente ao primeiro

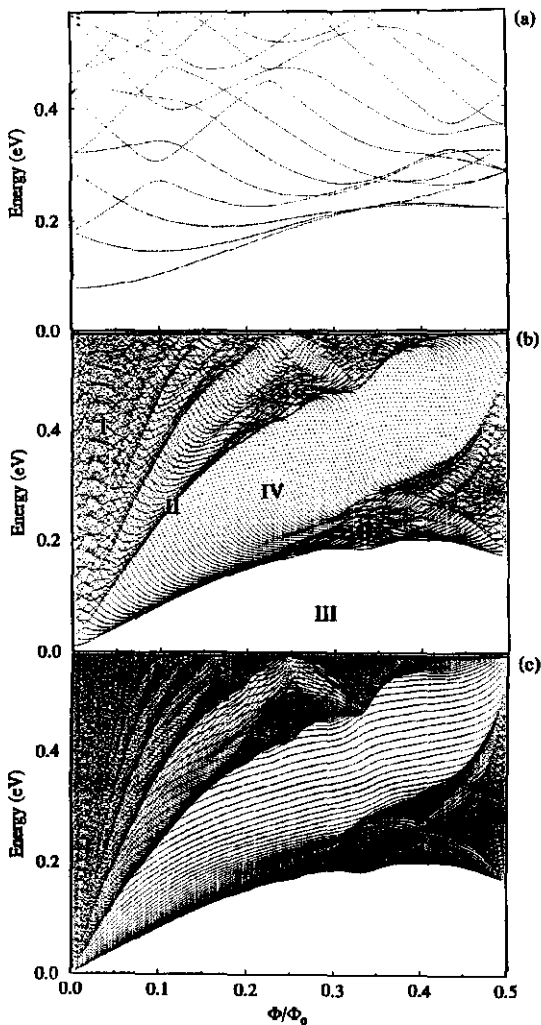


Figura 3.2: (a) Espectro de energia em função de ϕ/ϕ_0 para uma caixa de 5×5 sítios da rede hospedeira ($V_h = 0.0$ eV). (b) Mesmo que em (a), exceto que a caixa agora é composta de 15×15 sítios da rede hospedeira. (c) Mesmo que em (a) e (b) porém a caixa é formada por 25×25 sítios da rede hospedeira.

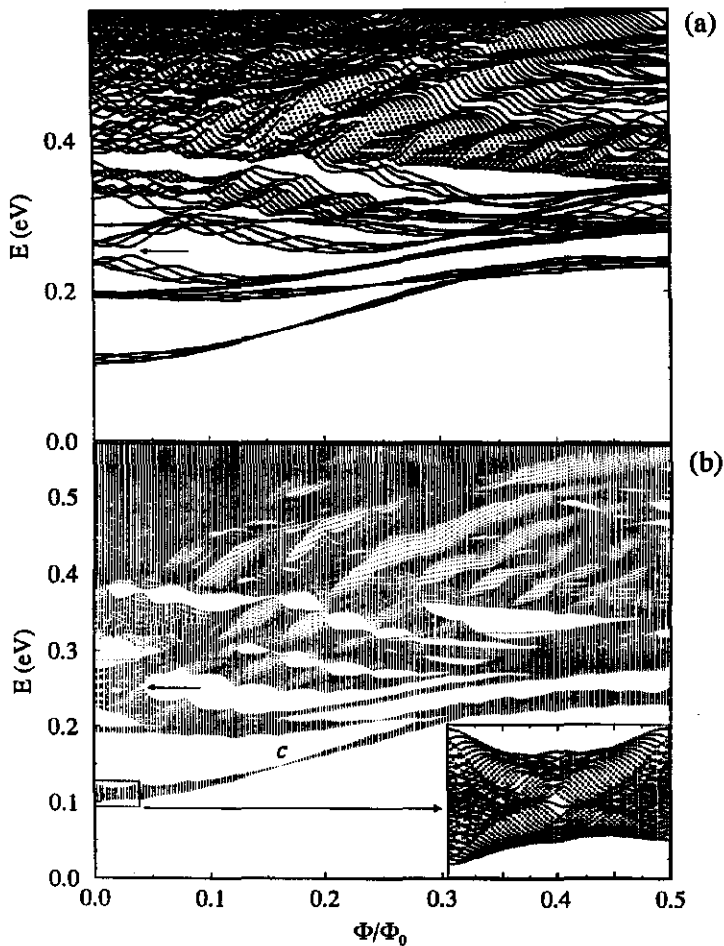


Figura 3.3: Espectro de energia em função de ϕ/ϕ_0 para (a) 3x3 células unitárias da modulação e (b) 7x7 células unitárias da modulação.

estado da Fig. 3.2a e além disso é formada por quatro estados. O caso da Fig. 3.3a é uma caixa com 9 “antidots”. Esta estrutura forma 4 “dots” dentro dela no regime de modulação forte considerado aqui. Estes “dots” se acoplam e formam a banda mais baixa da Fig. 3.3a. A segunda banda formada em $E \approx 0.19$ eV não é uma banda de “bulk”, pois é formada por oito estados. Ela é a primeira banda dos estados laterais. Estamos procurando bandas formadas por quatro estados. A próxima banda que se encaixa nesse contexto é a encontrada em $E \approx 0.24$ eV e logo em seguida, $E \approx 0.26$ eV, também encontramos outra banda formada por quatro estados. Estas duas são, respectivamente, a segunda e terceira bandas de “bulk”. Vemos que a segunda e terceira banda desta figura são similares ao segundo e terceiro estados da Fig. 3.2a. Uma pequena banda estreita na região de $E \approx 0.28$ eV é oriunda dos estados de canto, conforme veremos na análise das densidades de probabilidade e de corrente.

A seta nas Figs. 3.3a e 3.3b indicam como se forma e evolui o “gap” entre a segunda e terceira bandas de “bulk” e também mostra a variação do acoplamento das bandas de “bulk” com as bandas laterais conforme aumentamos o tamanho da caixa. Na Fig. 3.3a temos 4 “dots” dentro da caixa. Estes 4 “dots” originam um “gap” entre a segunda e terceira bandas de “bulk” (seta), sendo que cada uma destas é formada por 4 estados. Na Fig. 3.3b nós temos agora 7x7 células unitárias da modulação, num total de 49 “antidots”/36 “dots” dentro da caixa. Isto dá origem a 6 bandas, cada uma formada por 6 estados que se dividem simetricamente formando a segunda e terceira banda de “bulk” (seta). Notamos claramente que o número de bandas aumentou numa razão proporcional ao número de “dots” do sistema e que os “gaps” diminuíram seu espaçamento. A consequência disso no caso infinito, onde teremos um número muito grande de “dots” (infinitos) formando a rede é que haverá a formação infinitas bandas separadas por um número infinito de “gaps” porém estes “gaps” terão medida nula. Isto é verificado na Fig. 2.6c do capítulo 2.

Também notamos que o acoplamento entre a primeira banda de “bulk” e a primeira banda de estados laterais se intensifica com o aumento de tamanho da caixa, conforme variamos o número de fluxo ϕ/ϕ_0 . Isso se deve ao fato de que aumentando o tamanho da caixa estaremos, no regime de modulação forte, colocando mais “dots” dentro dela e portanto mais estados também. O aumento destes por sua vez faz com que os “gaps” entre as bandas fiquem

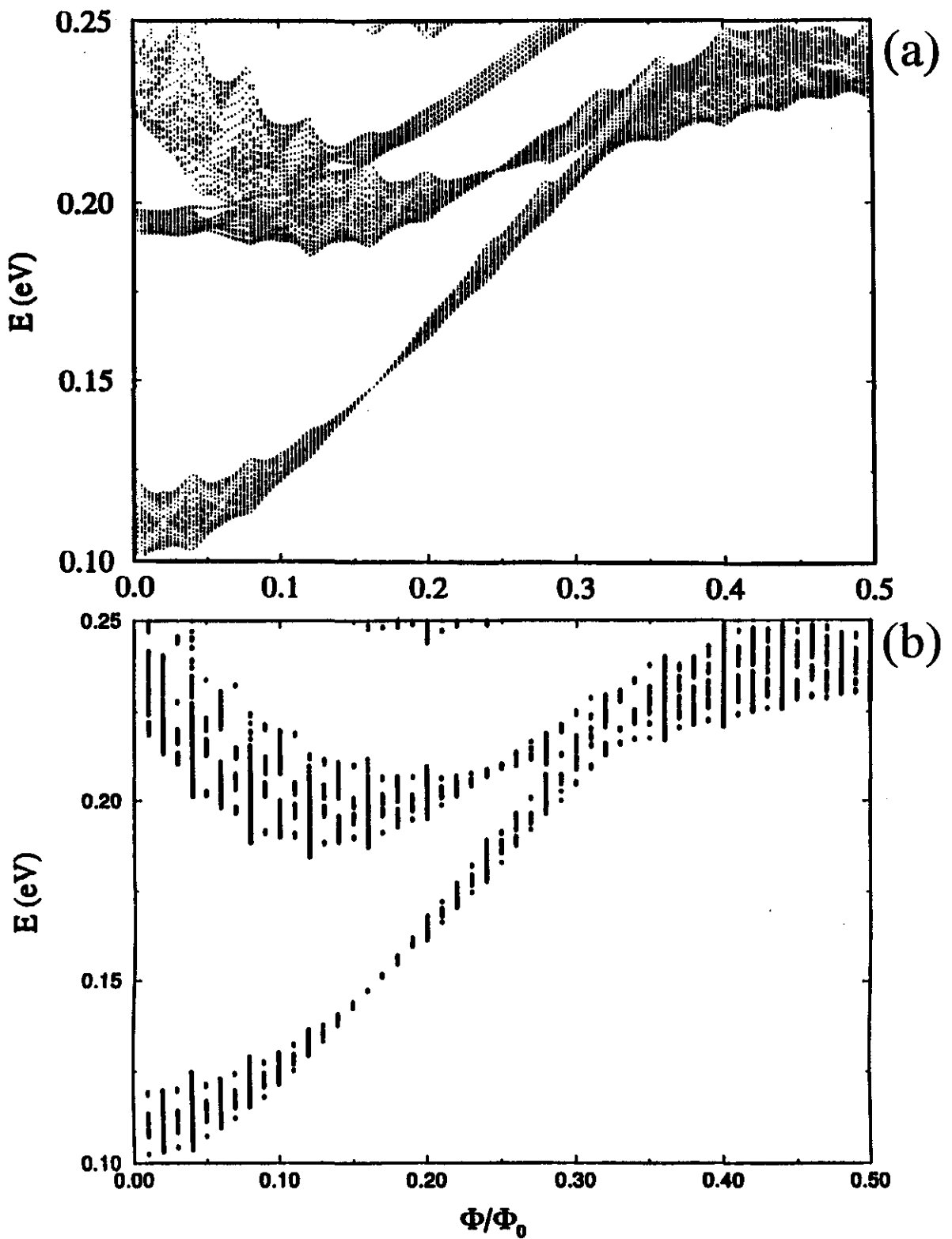


Figura 3.4: (a) Espectro de energia em função de ϕ/ϕ_0 para o caso de 7×7 células unitárias da modulação. (b) Mesma faixa de energia que em (a), exceto que se trata do sistema infinito do cap. 2. Note que as bandas de “bulk” se situam exatamente nas mesmas posições em energia, sendo que a diferença mais visível entre as duas é a primeira banda de estados laterais formada no caso confinado ($E \approx 0.19$ eV).

menores e ocorra um acoplamento para valores mais baixos de ϕ/ϕ_0 .

Ainda na Fig. 3.3b há uma região onde notamos uma constrição da primeira banda, marcada por ‘c’. Esta é uma característica geral do problema, pois também acontece no sistema infinito. A competição entre confinamento pelo potencial e confinamento pelo campo magnético leva a uma completa localização dos estados (colapso da largura da banda). Este efeito ocorre também para sistemas fracamente modulados, onde uma análise perturbativa simples é possível [42]. Para valores do fluxo $\phi/\phi_0 > 0.2$ o modelo está fora do limite do contínuo da rede hospedeira e portanto perde-se a interpretação física do espectro.

Comparando-se o espectro de energia da Fig. 3.3b com a Fig. 2.6c (cap. 2) vemos que um sistema finito de 7×7 “antidots”, para os parâmetros escolhidos, reproduzem bem as principais características do espectro auto-similar dos sistemas infinitos. Essa similaridade fica evidenciada na Fig. 3.4a e 3.4b onde um espectro mais denso para o caso infinito é utilizado. Note que excetuando-se os estados laterais ambos os espectros são idênticos.

3.4 Estados de Borda $\times$ Espectro de Hofstadter

Os resultados mostrados até agora apresentam ainda algumas características importantes que precisam ser discutidas. Tendo a Fig. 3.3b em mente, notamos que existem dois tipos de estados de borda. No primeiro tipo enquadram-se os estados confinados de fato à superfície, estados laterais e de canto. No segundo tipo temos os estados de borda que preenchem os “gaps” do espectro tipo Hofstadter (zoom da figura). O primeiro tipo de estados depende do confinamento imposto ao sistema modulado, enquanto que o segundo tipo é devido apenas ao fato da rede de “antidots” ser finita.

Isto pode ser verificado quando modificamos a superfície do cristal bidimensional. O processo de fabricação permitiria variar esta superfície. Por exemplo, aumentando a distância entre a borda e os “antidots” mais próximos à borda como no caso experimental da Fig. 3.5, onde a distância entre a borda e os “antidots” é a em vez de $a/2$.

Essa “moldura” diminui o confinamento dos estados laterais do primeiro tipo, levando a uma mistura maior dos mesmos com os estados de “bulk”. Porém, essa “moldura”

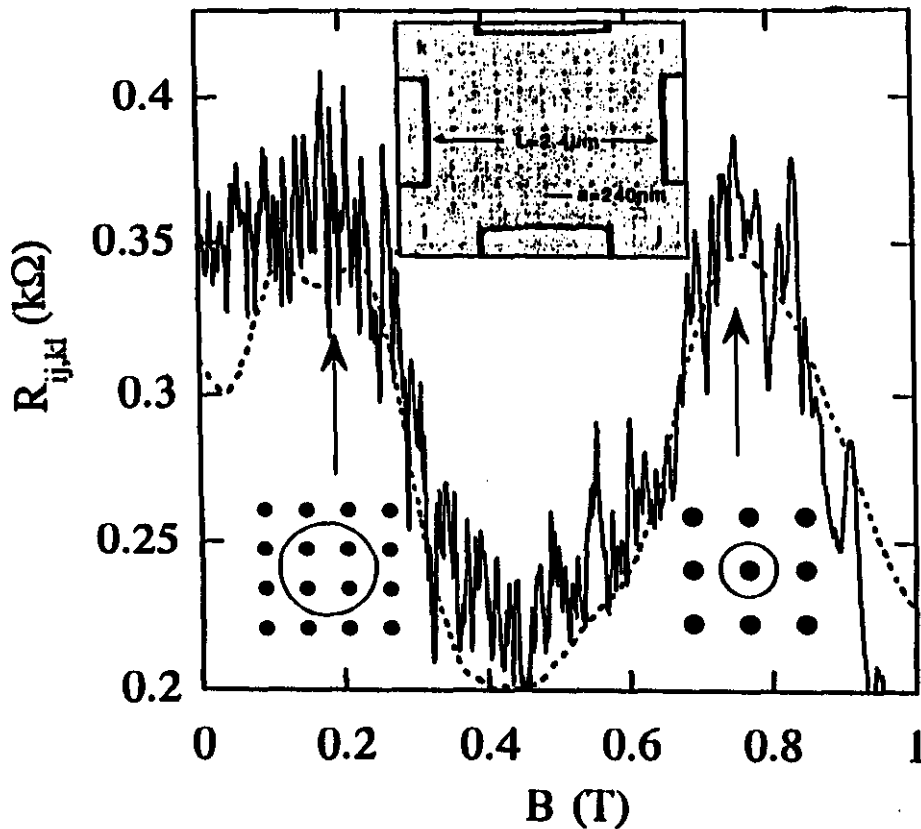


Figura 3.5: Magnetoresistência de uma rede finita de “antidots” a 4.2K (linha pontilhada). Desenhos esquemáticos das superredes abaixo e as setas indicam a relação entre um máximo e a respectiva órbita eletrônica na rede de “antidots”. Resistência traçada após a amostra ter sido resfriada para 30mK (linha sólida). Figura de dentro acima: imagem da superfície da heteroestrutura de AlGaAs. A caixa finita foi produzida por litografia de feixe de elétrons com $p=240nm$ e 9x9 períodos. Imagem feita com microscópio de força atômica [K. Ensslin, R. Schuster and T. Schlösser, Proceeding of Nato School, Kiev, 1995].

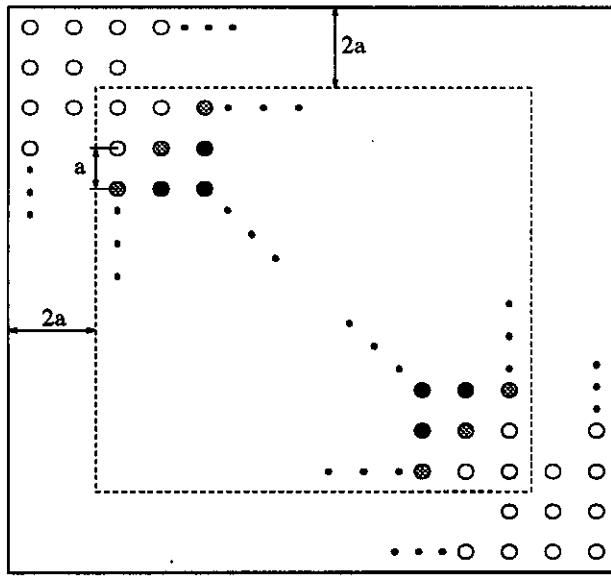


Figura 3.6: Representação esquemática da caixa com paredes (bordas) afastadas de 2 parâmetros de rede da rede hospedeira ($2a$).

não deve modificar os estados da borda internos (segundo tipo). Isso pode ser visualizado no espectro da Fig 3.7 para o mesmo sistema da Fig. 3.3, mas agora com uma moldura de 2 sítios hospedeiros entre os “antidots” e a caixa de confinamento. Notamos que os estados laterais “abaixam” em energia e ainda temos a formação de um espectro tipo Hofstadter para a primeira banda de “bulk” que se situa energeticamente acima da banda de borda.

3.5 Densidade de Probabilidade e Elementos de Corrente

A análise simplificada da formação dos estados no caso confinado via crescimento da caixa incluindo mais células unitárias da modulação necessita confirmação. Para isso, calculamos as densidades de probabilidade e densidades de corrente locais. A densidade de probabilidade é obtida diretamente via

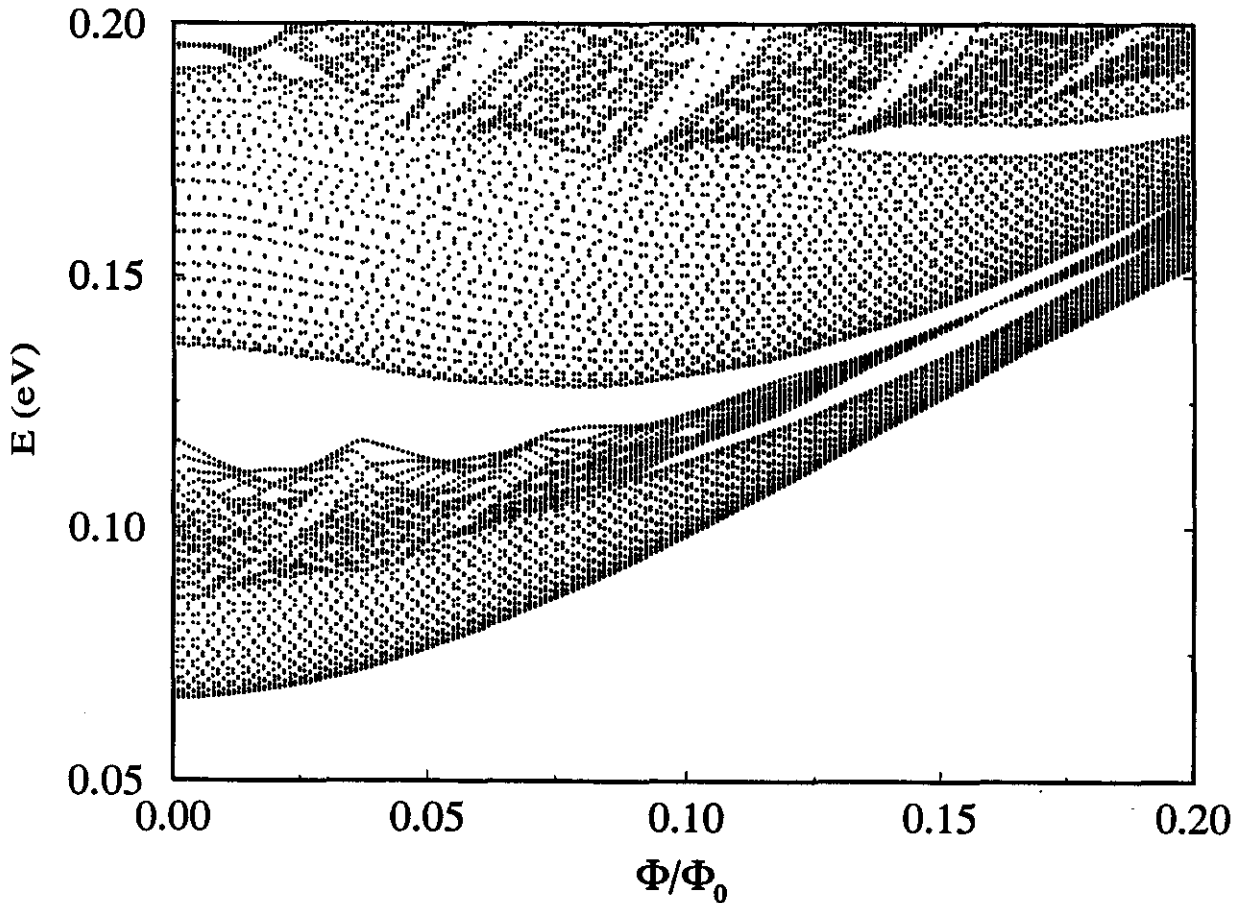


Figura 3.7: Espectro de energia em função de ϕ/ϕ_0 para uma caixa com paredes afastadas por dois sítios da rede hospedeira (2a). A primeira banda de estados laterais se situa agora em um nível mais baixo que a primeira banda de “bulk”. O espectro do tipo borboleta para a primeira banda de “bulk” se deforma mas está presente.

$$\text{Dens. Probab.} = |\langle \Psi | \Psi \rangle|. \quad (3.2)$$

No modelo estudado neste trabalho, a corrente se dá via “hopping” entre as ligações. Entretanto, para uma melhor visualização é conveniente tratar a corrente como elementos de densidade de corrente locais associados com os sítios. Assim, para o cálculo da densidade de corrente local utiliza-se o resultado usual dos livros texto, uma combinação da equação de Schrödinger dependente do tempo e a equação da continuidade:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*], \quad (3.3)$$

que no caso do modelo TB bidimensional estudado (interação somente entre primeiros vizinhos, 1 orbital tipo s por sítio) resulta em

$$\mathbf{j}_{m,n} = -\frac{i\hbar}{2m^*} \frac{1}{2a} \left\{ \Psi_{m,n}^* \left[(\Psi_{m+1,n} - \Psi_{m-1,n}) \mathbf{x} + e^{2\pi i n \phi / \phi_0} (\Psi_{m,n+1} - \Psi_{m,n-1}) \mathbf{y} \right] - \text{H.c.} \right\}. \quad (3.4)$$

No limite contínuo, a equação acima se reduz a forma usual conhecida para densidade de corrente [62].

Na Fig. 3.8 temos, de cima para baixo, densidade de probabilidade, contornos da densidade de probabilidade e densidade local de corrente para $\phi/\phi_0 = 0.02$. No lado esquerdo temos o primeiro estado da primeira banda de “bulk” para uma caixa contendo 3x3 células unitárias da modulação e no lado direito o mesmo estado para uma caixa com 4x4 células unitárias da modulação. Notamos que no regime de modulação forte utilizado aqui temos confinamento destes estados pelas paredes dos “dots” internos (estrutura do tipo caixa-de-ovo discretizada).

Na Fig. 3.9, de cima para baixo temos a densidade de probabilidade, contornos e densidade local de corrente, também para um caso de 3x3 células unitárias da modulação. À esquerda está o último estado da primeira banda lateral. Para $\phi/\phi_0 = 0.05$ já existe um acoplamento fraco deste estado com a segunda banda de estados de “bulk”. À direita temos o primeiro estado de canto para $\phi/\phi_0 = 0.02$

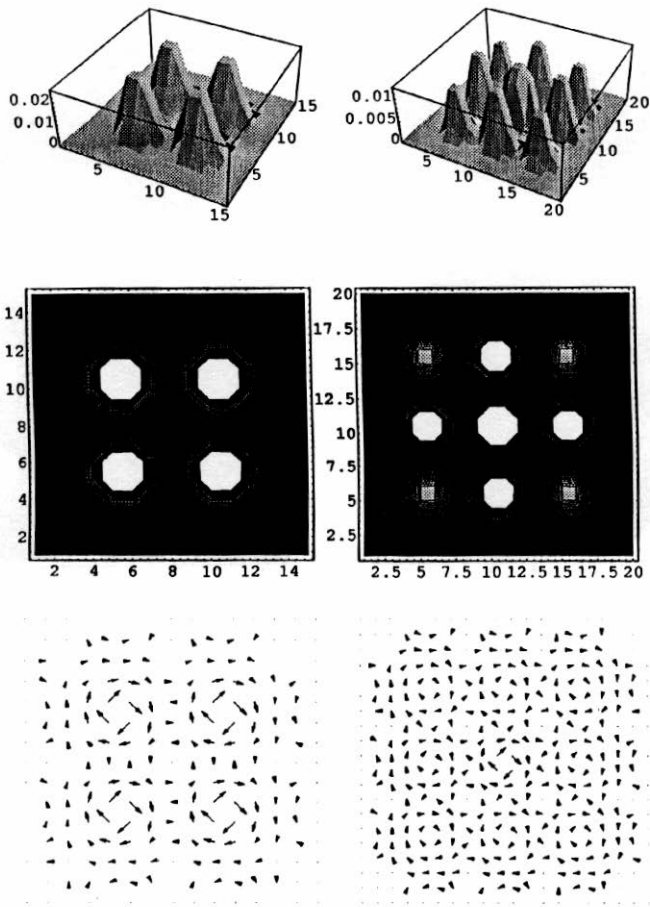


Figura 3.8: Lado esquerdo: 3x3 células unitárias da modulação. Lado direito: 4x4 células unitárias da modulação. Em cima: densidade de probabilidade. No meio: Contornos da densidade de probabilidade. Em baixo: densidade local de corrente. Valores obtidos para $\phi/\phi_0 = 0.02$, i.e. estado da primeira banda de "bulk".

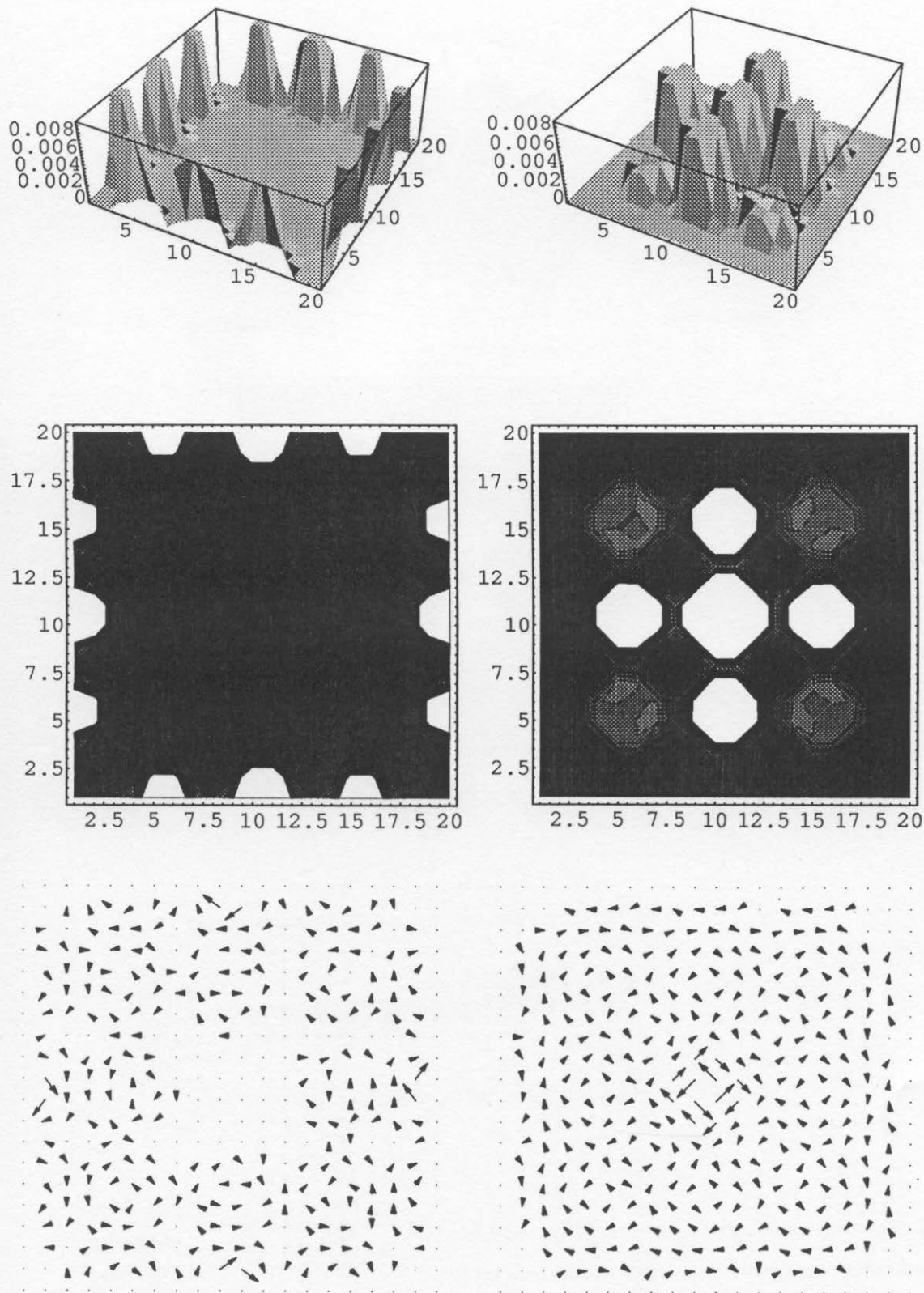


Figura 3.10: $\phi/\phi_0 = 0.02$. Esquerda: 1o estado da 1a. banda lateral para 4x4 células unitárias da modulação. Direita: 1o. estado da segunda banda de bulk. De cima para baixo temos densidade de probabilidade, contornos e densidade local de corrente.

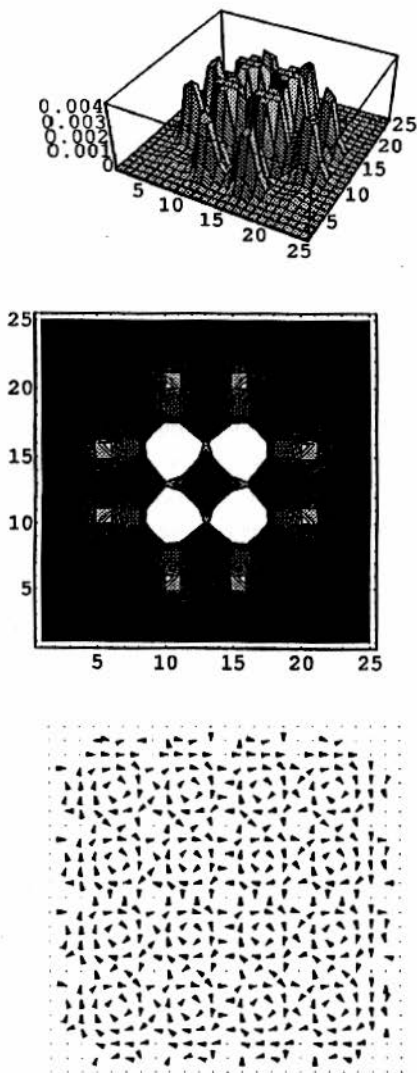


Figura 3.11: $\phi/\phi_0 = 0.05$. Caixa com 5x5 células unitárias da modulação. De cima para baixo: densidade de probabilidade, contornos e densidade de corrente.

Na Fig. 3.10 temos um caso análogo ao da Fig. 3.9, porém para uma caixa maior contendo 4x4 células unitárias da modulação. Focalizando nessa figura a densidade de corrente para o primeiro estado da segunda banda de bulk (direita em baixo) vemos que no centro a densidade de corrente possui sentido anti-horário. Um pouco mais externo vemos que se forma um anel de elementos de corrente no sentido horário, ou seja, oposto ao do centro. Isso era esperado no caso da segunda banda de “bulk”. Nos demais “dots” formados também acontece esse comportamento, mas os vetores possuem módulo menor que os centrais sendo menos visíveis. No lado esquerdo temos o 1o. estado da 1a. banda lateral.

Na Fig. 3.11 mostramos o primeiro estado de “bulk” para uma caixa formada por 5x5 células unitárias da modulação e $\phi/\phi_0 = 0.05$. A densidade de probabilidade possui menos intensidade que nas caixas menores. Isso se reflete nos elementos de corrente, cujo módulo diminui, embora ainda seja possível visualizar elementos de corrente nos “dots”.

3.6 Sumário

Em resumo, o modelo infinito do cap. 2 foi alterado para um caso onde confinamos determinado número de sítios da rede hospedeira – uma caixa com $(n/5) \times (n/5)$ células unitárias da modulação. O maior número de sítios da “caixa hospedeira” estudado foi de 35X35 (Fig. 3.3b) que equivale a 7X7 células unitárias da modulação (devido a restrições computacionais). Um fato importante do estudo destes sistemas confinados é que foi possível observar como se forma a estrutura de bandas cuja verificação se deu pelas densidades de probabilidades e densidades de corrente e extrapolar esse conhecimento adquirido para o caso infinito. Também analisamos o efeito das paredes da caixa na formação dos estados laterais. Essa análise é importante já que superredes laterais com parâmetros de rede da ordem de 80nm já estão sendo fabricados e possuem uma região de confinamento pequena, Fig. 3.5 [26]

Como esperado, este sistema apresentou características próprias e características do caso infinito, sendo que podemos sumariá-lo da seguinte forma:

- descrição não de uma célula unitária com condições periódicas de contorno (condição de Bloch), mas uma caixa contendo determinado número de células unitárias da modulação

descrita por $n \times n$ sítios da rede hospedeira,

- o espectro do tipo-Hofstadter, para as bandas mais baixas (confinadas), pode ser identificado em qualquer regime de modulação, como no caso infinito,
- aparecimento dos estados de borda entre os “gaps” dos estados de “bulk” confinados, sendo que estes estados se acoplam com os estados de “bulk” conforme aumentamos o campo, ou em outras palavras, *o campo atua como elemento sintonizador no acoplamento entre os estados de “bulk” e estados de borda*,
- estados confinados pelos “dots” passam a ter confinamento pelo campo magnético (colapso) conforme aumentamos o campo,
- o crescimento da caixa da rede hospedeira e consequentemente do número de células unitárias da modulação confinadas possibilitou um maior entendimento de como se formam as bandas neste caso e no sistema infinito.

Até agora estudamos modelos cujo parâmetro de rede da rede modulada é de 100 Å. A estrutura de “antidots”/“dots” formada no caso de modulação forte (um tipo de caixa-de-ovo discretizada) é pequena se comparada aos valores crescidos em laboratório (cerca de 1000 Å). Uma célula unitária maior, de 11x11 sítios foi montada com fins investigativos. Era necessário um perfil de modulação descrito por mais sítios cujas colunas de potencial estivessem suficientemente afastadas umas das outras para não haver confinamento por uma estrutura de “dots” formados como no caso do cap. 2, mas sim colunas de potencial como nos casos crescidos experimentalmente, vide cap. 1. Este último arranjo é o assunto a ser tratado no capítulo 4.

Capítulo 4

Redes de “Antidots”

4.1 Introdução

Nos capítulos precedentes desta tese construímos um modelo para um problema acadêmico com uma longa história, cujo interesse ressurgiu nos últimos anos devido a recentes avanços em nanofabricação de sistemas baseados em semicondutores [15, 27, 18, 10].

Questões em aberto foram abordadas, como o comportamento de espectros autossimilares em estruturas eletrônicas de muitas bandas, bem como a transição entre regimes de modulação fraca e forte. Outros problemas clássicos de Física de Estado Sólido – estados de superfície – foram revisitados em novo contexto, onde o comportamento de tais estados tem papel fundamental sobre efeitos de magnetotransporte, observáveis experimentalmente. Esse último tópico discute um aspecto de um problema relevante: a modelagem de sistemas reais e a observabilidade dos efeitos [45] já discutidos nesses sistemas.

Tendo por objetivo a aproximação à realidade experimental um passo importante é o aumento da célula unitária resultando num aumento desejado do parâmetro de rede do cristal artificial. Por outro lado, o aumento da base flexibiliza a modelagem do perfil de potencial além de possibilitar uma melhor descrição de grandezas físicas de interesse como densidades de probabilidades e de corrente. Em princípio essa expansão da célula unitária é simples e as etapas de cálculo são as mesmas já descritas.

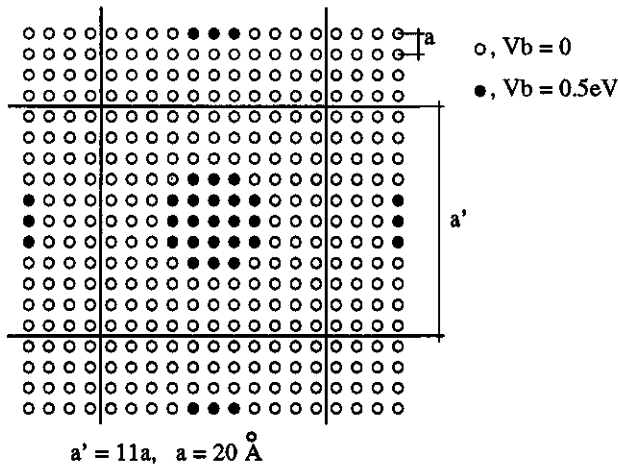


Figura 4.1: Representação esquemática da superrede lateral de parâmetro de rede $a' = 11a$, $a = 20 \text{ \AA}$.

O que se fez foi aumentar o número de sítios da rede hospedeira descrevendo a célula unitária da modulação que agora é composta de 11×11 sítios. Conforme citado no cap. 1, a forma exata do perfil de potencial das redes de “antidots” fabricadas é desconhecida, assim optamos por uma variação abrupta da coluna de potencial V_b , sem o degrau de “suavização” dos caps 2 e 3 (V_b e $V'_b = V_b/2$). Esta coluna rígida de potencial ocupa um lugar central na célula unitária da modulação e é composta por 21 sítios. A forma é quase uma circunferência (simulação), um quadrado central com as bordas arredondadas, de acordo com a Fig. 4.1.

A escolha do perfil de potencial acima corresponde a uma aproximação do bilhar de Sinai periódico [63].

4.2 Estrutura Eletrônica e Espectro de Energia

A estrutura de bandas para o bilhar de Sinai periódico com $V_b = 0.5 \text{ eV}$ é qualitativamente similar ao sistema tipo caixa-de-ovo descrito no capítulo 2. Nota-se, no entanto, um número muito maior de bandas devido ao aumento do parâmetro de rede da modulação. Este aumento, associado à diminuição do confinamento efetivo leva a uma diminuição significativa dos “gaps”.

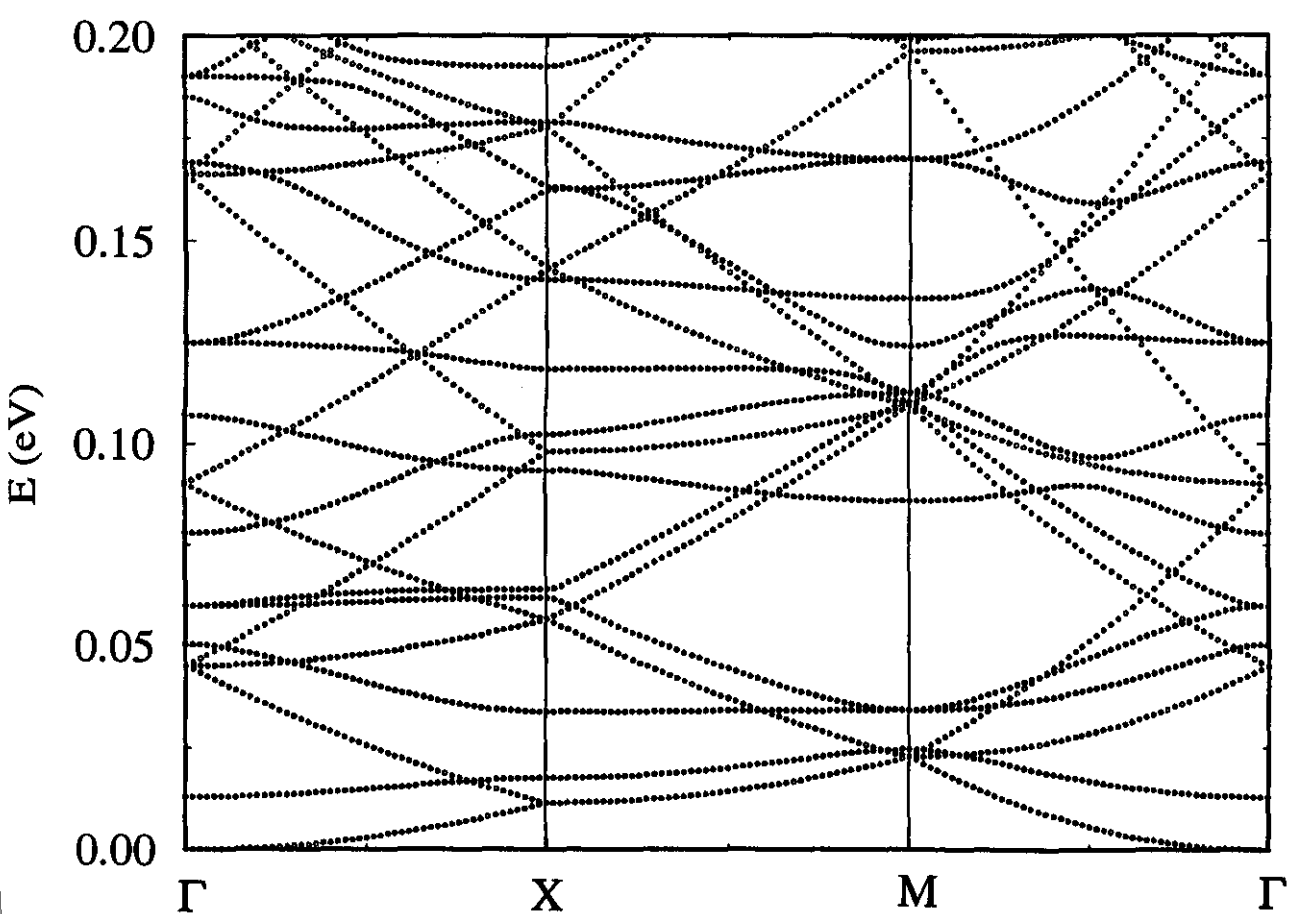


Figura 4.2: Estrutura de bandas sem campo para a célula unitária formada de 11×11 sítios da rede hospedeira, conforme esquema da Fig. 4.1. Círculos brancos: $V_b = 0$ eV. Círculos pretos: $V_b = 0.5$ eV.

Na presença de campo magnético, o espectro $E(\phi/\phi_0)$ apresenta-se mais rico em detalhes do que o sistema estudado no cap. 2, a exemplo do que acontece com a estrutura eletrônica na ausência de campo magnético, Fig. 4.2.

Na ausência de modulação, obtemos o limite esperado do espectro tipo-Borboleta relacionado com a rede hospedeira, Fig. 4.3a. Este comportamento do espectro muda agora, se comparado ao caso do cap. 2 – sistema infinito fortemente modulado – na presença de modulação de potencial. Não há mais as estruturas do tipo caixa-de-ovo, formando uma rede de “dots” dentro da rede de “antidots”. As regiões outrora de “dots” são agora amplamente conectadas e o que temos de fato é uma rede de colunas de potencial, Fig 4.1, com espectro característico dado pela Fig. 4.3b. Outra comparação interessante é o da Fig. 4.3b com os

casos não modulados finitos do cap. 3, Figs. 3.2b e 3.2c. Nestas vemos uma série de bandas se formando entre os níveis de Landau, identificados como estados laterais no contexto de sistemas finitos. Aqui acontece algo muito semelhante ao sistema confinado, embora se trate de um sistema infinito: *podemos ver na Fig.4.3b quebra da degenerescência dos níveis de Landau em bandas com estrutura interna e estados típicos de borda aparecendo nos “gaps” entre as bandas de Landau.* Estes últimos estados também são estados laterais devidos às bordas internas definidas pelas colunas de potencial da superrede lateral.

Em outras palavras, embora a amplitude de modulação para as superredes laterais descritas no presente capítulo e no capítulo 2, seja a mesma ($V_b = 0.5$ eV), a modificação do perfil dessa modulação introduz diferença qualitativas às propriedades eletrônicas das mesmas.

4.3 Estrutura Fina do Espectro

Lembrando que a emulação da aproximação da massa efetiva pelo nosso modelo é válida para o limite de baixos fluxos e energias, vamos nos limitar, Fig. 4.4b, ao espectro na região $0 \leq E \leq 0.10$ eV e $0 \leq \phi/\phi_0 \leq 0.10$. Uma análise detalhada desta figura mostra aspectos interessantes:

- *nota-se claramente o espectro tipo Hofstadter associado à banda de mais baixa energia,*
- *Os estados de borda (bandas menores que parecem se “desprender” da 1a banda) também apresentam estrutura interna para pequenos fluxos de campo magnético.*

Essas duas regiões do espectro de energia correspondem, como veremos, a estados que tendem a se confinar na região entre 4 “antidots” ou circundando um “antidot”, respectivamente. Esse comportamento pode ser verificado pelo mapeamento das densidades de probabilidade. Por outro lado espera-se que estes diferentes estados possam ser associados a órbitas semi-clássicas como as esquematizadas na Fig. 4.4a.

De fato essa associação é tema de trabalhos que começam a surgir na literatura. Em trabalho recente publicado por Ishizaka e colaboradores [64] é utilizado para o tratamento

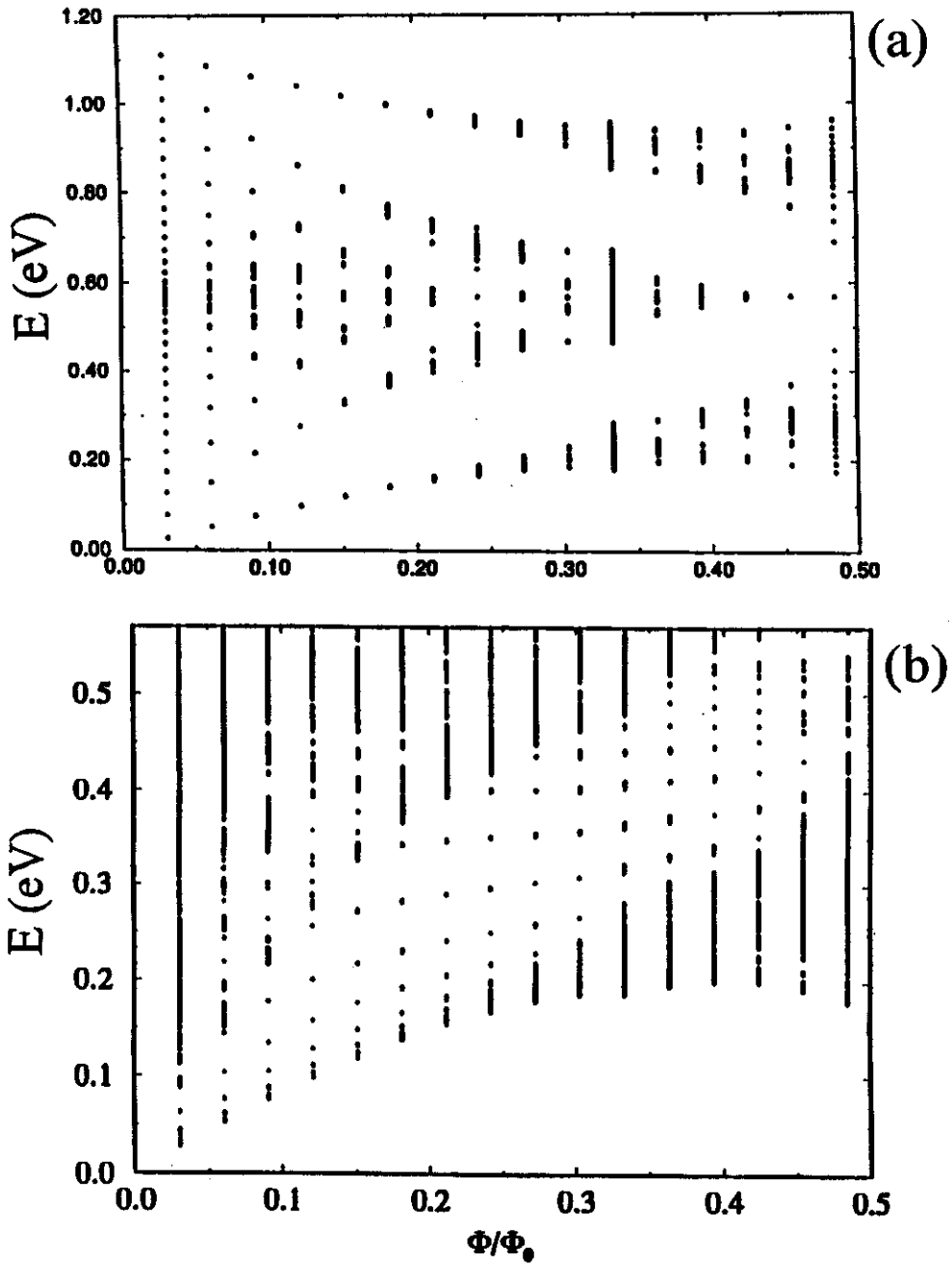


Figura 4.3: Espectro de energia em função de ϕ/ϕ_0 para (a) $V_b = 0$ eV e (b) $V_b = 0.5$ eV.

do sistema 2D modulado um potencial do tipo $U(x, y) = U_0[\cos(\pi x/a) \cos(\pi y/a)]^{2\beta}$, com $\beta = 1, 2$. Neste trabalho é feita uma comparação do espectro de energia em função do campo com a Teoria das Órbitas Periódicas (TOP) de Gutzwiller [65, 66]. A associação entre autovalores do espectro de energia com órbitas correspondentes é discutida nesse trabalho, onde a região do espectro associada à órbitas abertas (“skipping orbits”) é identificada para autovalores com número quântico grande e fluxos magnéticos baixos.

O comportamento do espectro $E(\phi/\phi_0)$ da Fig. 4.3b pode ser bem entendido qualitativamente, como descrito a seguir.

As dimensões características desse sistema permitem o aparecimento de todos os aspectos relevantes de espectros de energia dos sistemas reais, embora esses – no estado da arte atual – tenham parâmetros de rede ($\simeq 800 \text{ \AA}$) que excedem o caso estudado aqui.

Por um lado temos que nos restringir ao limite contínuo da rede hospedeira, o que leva a validade do modelo para $\phi/\phi_0 \leq 0.2$. Esse limite pode ser verificado na 4.3a, onde para fluxos de campo magnético altos a degenerescência dos níveis de Landau é quebrada pela estrutura da rede hospedeira, a exemplo do que já foi discutido no cap. 2.

Por outro lado, a separação entre as colunas é agora suficiente para que o comprimento magnético possa ser menor que essa separação para valores de ϕ/ϕ_0 ainda no limite de validade do modelo.

Assim sendo devemos observar, no espectro, estados que se confinam fortemente nas regiões definidas entre quatro colunas e estados que se localizam em torno de cada coluna. Esses dois tipos de estado, com o aumento do campo magnético, passam a não perceber mais o potencial periódico. Com isso, a dispersão das bandas diminui com o aumento de ϕ/ϕ_0 e a estrutura interna autosimilar das mesmas tende a ser suprimida.

Por fim, os estados que se localizam preferencialmente na região entre “antidots” devem colapsar para os níveis de Landau do sistema não modulado, enquanto persistem estados de borda cada vez menos acoplados entre si, portanto com supressão progressiva de estruturas internas, a medida que aumentamos o campo magnético.

As energias dos estados de borda aumentam com o campo magnético, ao contrário do sistema finito (cap. 3), que tem as energias daqueles estados de borda diminuídos. Isto

pode ser entendido dentro de uma visão clássica. Órbitas ciclotrônicas internas às bordas tem circulação contrária às órbitas de “bulk” (“volume”) do sistema (bordas dos sistemas finitos estudados no cap. 3). No presente contexto temos órbitas externas às bordas, portanto com circulação no mesmo sentido que às órbitas de “bulk” (“volume”).

Embora um mapeamento detalhado dos estados seja difícil, nós identificamos claramente as características de espectros auto-similares nas bandas mais baixas. Um espectro tipo borboleta é nitidamente observado na primeira banda, que se mistura às bandas superiores para $\phi/\phi_0 > 0.02$.

4.4 Caracterização dos Estados

A função de onda para o caso infinito periódico nos sítios da rede hospedeira (cap. 2) [67] é

$$\Psi_j = \sum_{l=1}^q e^{i2\pi\phi jl} |l\rangle, \quad (4.1)$$

e não podemos simplesmente tomar $|\langle\Psi|\Psi\rangle|$ como a densidade de probabilidade conforme feito no cap. 3, mas sim fazer um rebatimento da célula unitária magnética na célula unitária usual (devido ao campo magnético no calibre de Landau) a cada $(i, j + n^2)$ onde n^2 é a dimensão da célula unitária. Dessa forma, o elemento densidade de probabilidade em (i, j) terá contribuições de:

$$(i, j + 1(n^2), (i, j + 2(n^2)), \dots (i, j + q(n^2)). \quad (4.2)$$

No restante repetimos o procedimento utilizado no cap. 3 e analisamos a densidade de probabilidade de alguns estados característicos associados ao ponto Γ ($\mathbf{k} = 0$). Para tal fim, fixamos o valor do fluxo de campo magnético em $\phi/\phi_0 = 0.011, 0.0404$ e 0.0606 .

O primeiro valor corresponde a um fluxo magnético na célula unitária do cristal 2D de $\phi'/\phi_0 = 4/3$ (vide cap. 2). Para esse valor de fluxo os autovalores de energia se agrupam em três subbandas na primeira banda, ou seja, o denominador q é que define o número de subbandas formadas a assim podemos dizer que se trata de um regime de modulação forte.

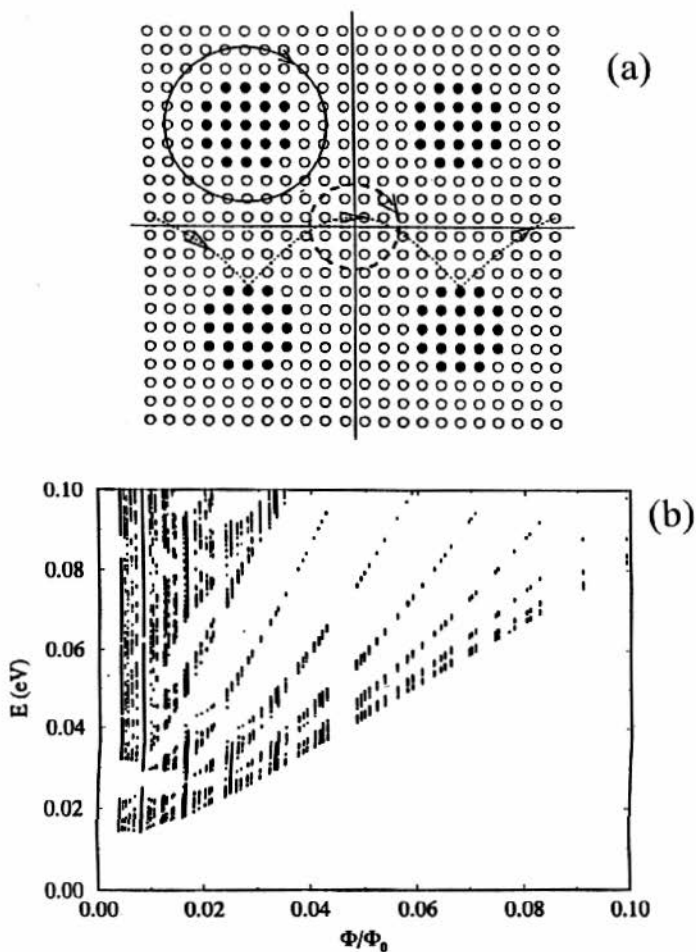


Figura 4.4: (a) Esquema mostrando tipos de órbitas analisadas no modelo estudado. (b) Espectro de energia em função de ϕ/ϕ_0 na região $E \leq 0.10$ eV, $\phi/\phi_0 \leq 0.10$. Há formação de estrutura do tipo-borboleta de Hofstadter para a primeira banda.

Na Fig. 4.5a mostramos a densidade de probabilidade associada ao 1o. estado para $\phi/\phi_0 = 0.011$. Este estado pertence à “borboleta” e se caracteriza por uma forte localização entre os “antidots”. Na 4.5b temos a densidade de probabilidade associada ao 10o. autoestado, que se encontra já na 2a. banda do espectro. Notamos que a densidade de probabilidade se concentra nos canais definidos por pares de “antidots”, um acordo com o que se espera para o primeiro estado excitado no centro da zona de Brillouin na ausência de campo magnético [31]. Autoestados mais altos em energias começam a apresentar densidades de probabilidade que se delocalizam em todas as regiões entre os “antidots”, como na Fig. 4.5c

Nas figuras 4.6 a 4.10, mostramos exemplos de densidades de probabilidade associadas a alguns estados do espectro para valores de fluxo de campo magnético maiores, $\phi/\phi_0 \simeq 0.04$ e $\phi/\phi_0 \simeq 0.06$.

Inicialmente podemos constatar o progressivo aumento do confinamento, devido ao campo magnético, dos estados da Borboleta associada à primeira banda, Fig. 4.5a, 4.6a e 4.8a. Esse aumento do confinamento magnético efetivo provoca a diminuição da largura da primeira banda do espectro, confirmando o que já vimos anteriormente.

A autosimilaridade do espectro de energia ainda pode ser seguida na Fig. 4.4b nas bandas mais altas. Para valores de fluxo magnético mais alto podemos identificar a simetria dos estados remanescente da estrutura eletrônica na ausência do campo magnético. As Figs. 4.6a e 4.6b mostram as densidades de probabilidade associadas aos autovalores $n = 1$, $E = 0.035$ eV (1ª. banda) e $n = 12$, $E = 0.0377$ eV (2ª. banda) para $\phi/\phi_0 = 0.04$. Novamente as densidades de probabilidade lembram claramente a simetria dos dois estados de energia mais baixa no centro da zona de Brillouin para esse sistema na ausência de campo magnético [31]. Por outro lado o estado $n = 27$, $E = 0.0596$ eV, Fig. 4.6c apresenta um caráter completamente diferente, que só pode ser entendido devido à existência de um confinamento magnético

Dentre os exemplos de densidades de probabilidade mostrados nas Fig. 4.5 a 4.10, vale a pena destacar alguns casos para $\phi/\phi_0 \simeq 0.06$. Encontramos estados que se delocalizam ao longo de canais em uma direção, o que seria uma assinatura de “skipping orbits”, Fig 4.8c.

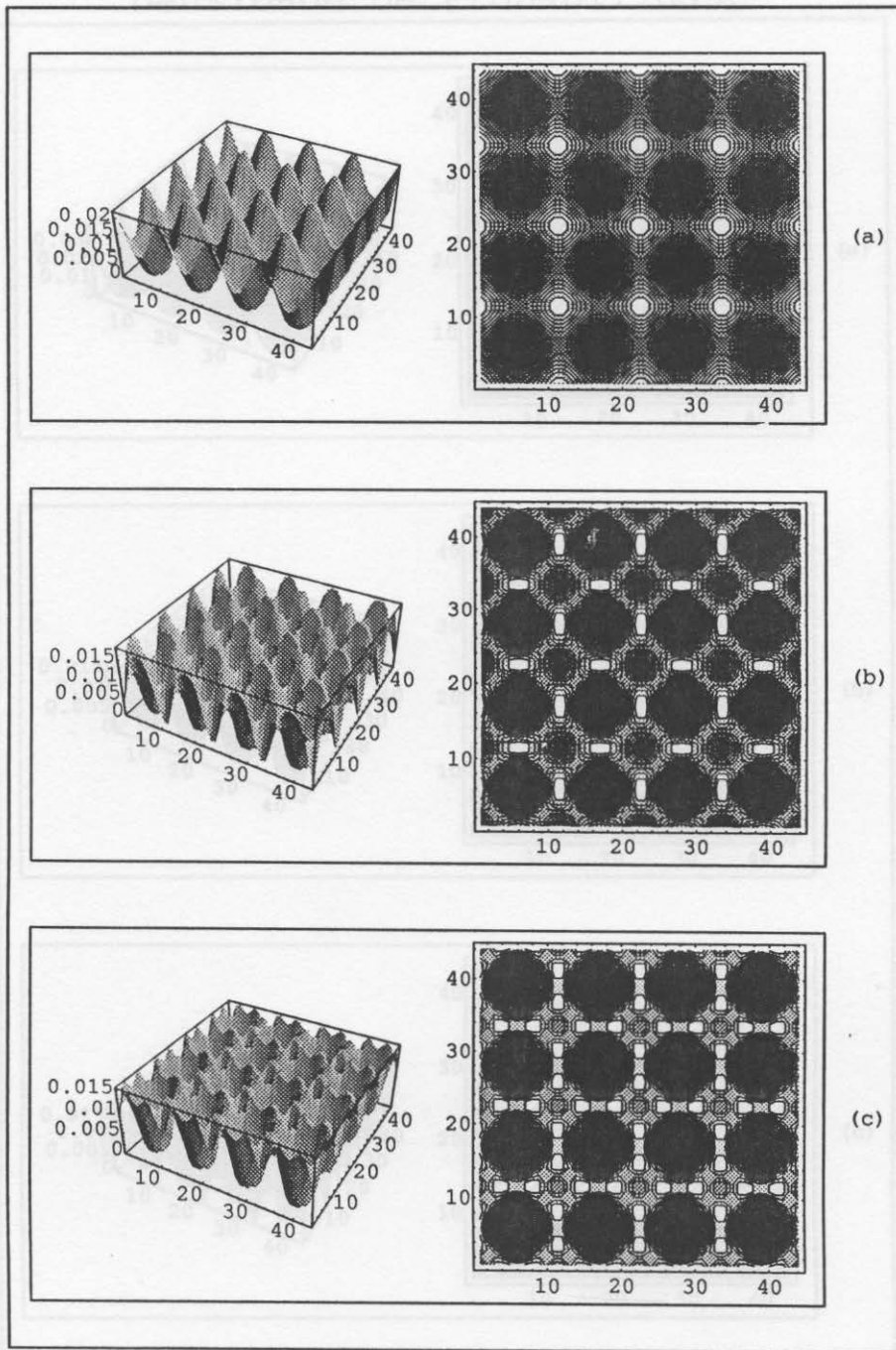


Figura 4.5: Densidade de probabilidade e respectivos contornos com $\phi/\phi_0 = 0.011$ para (a) 1o. estado, $E = 0.01642$ eV; (b) 10o. estado, $E = 0.03042$ eV; (c) 21o. estado, $E = 0.05546$ eV.

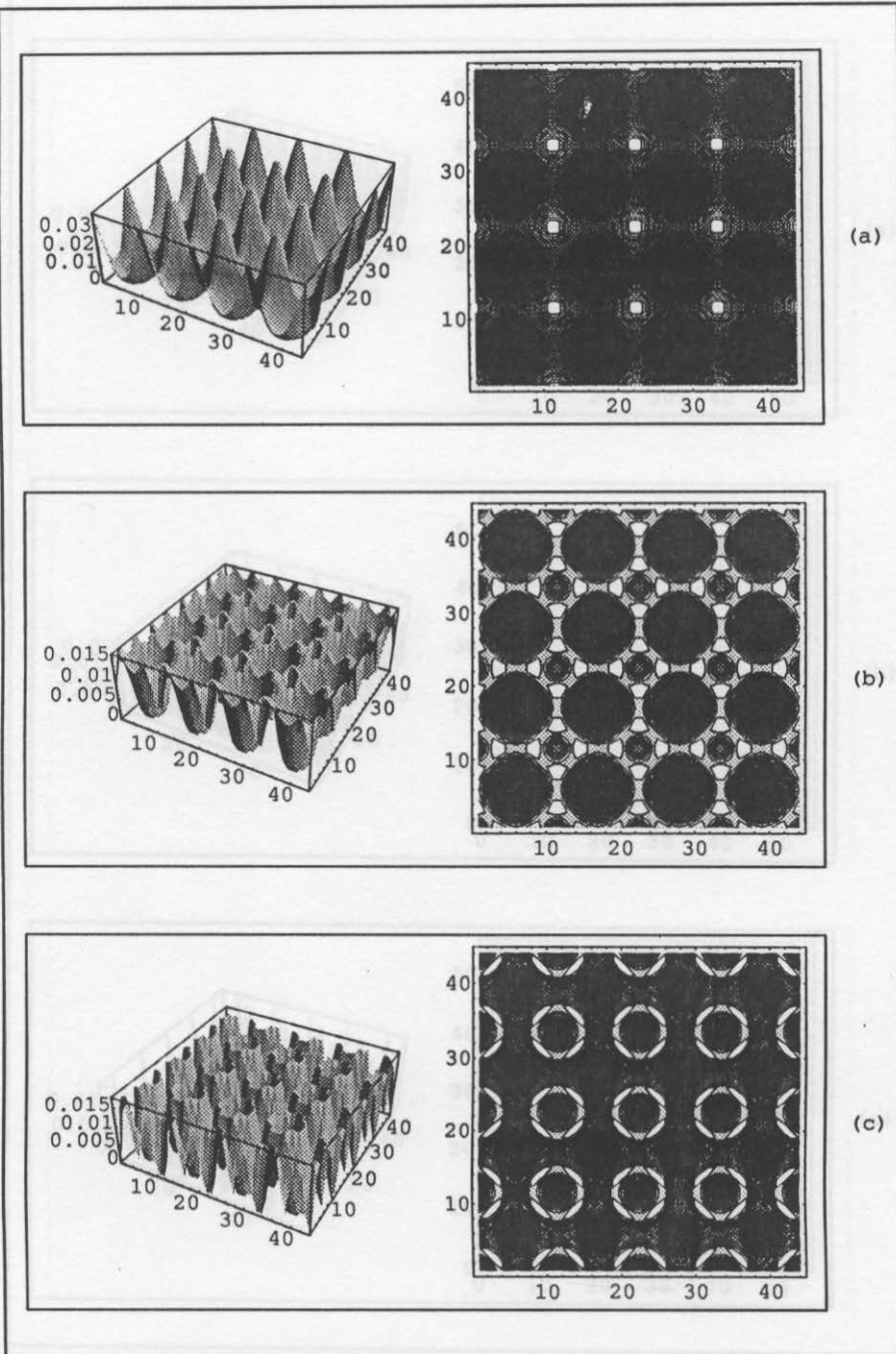


Figura 4.6: Densidade de probabilidade e respectivos contornos com $\phi/\phi_0 = 0.04$ para (a) 1o. estado, $E = 0.03520$ eV; (b) 12o. estado, $E = 0.03770$ eV; (c) 27o. estado, $E = 0.05955$ eV.

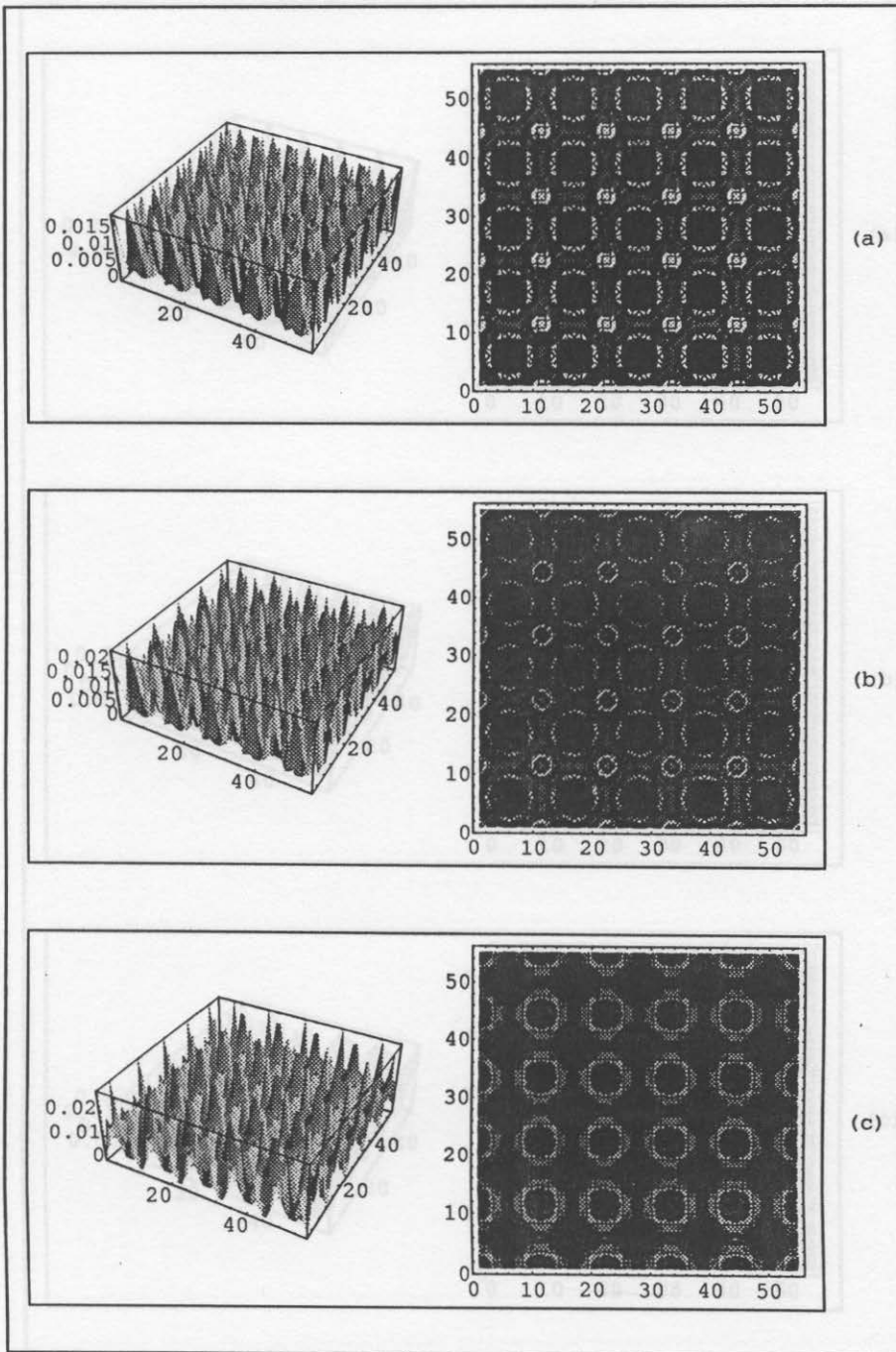


Figura 4.7: Densidade de probabilidade e respectivos contornos com $\phi/\phi_0 = 0.04$ para (a) 72o. estado, $E = 0.14323$ eV; (b) 75o. estado, $E = 0.14743$ eV; (c) 90o. estado, $E = 0.17442$ eV.

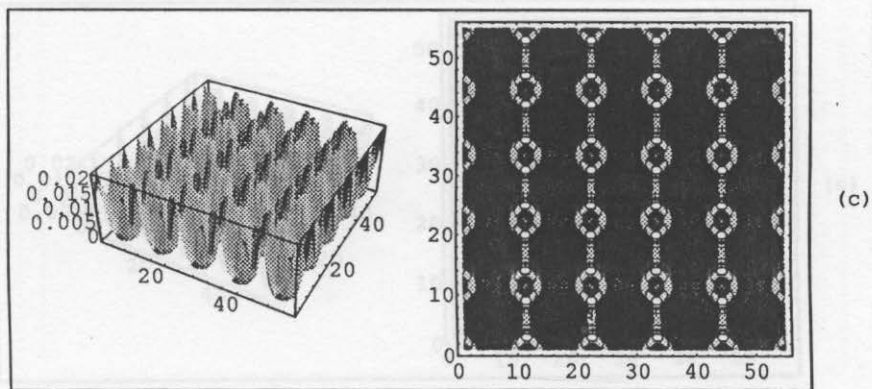
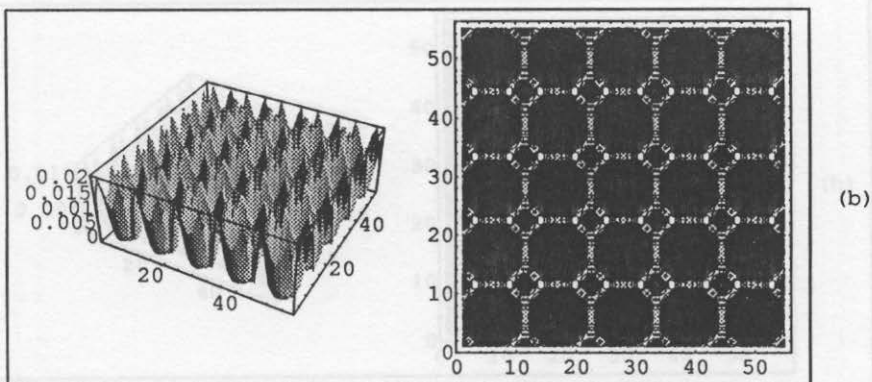
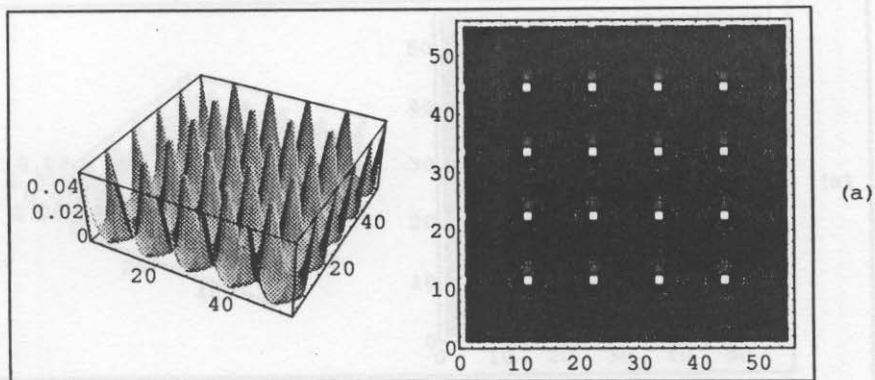


Figura 4.8: Densidade de probabilidade e respectivos contornos com $\phi/\phi_0 = 0.06$ para (a) 1o. estado, $E = 0.05160$ eV; (b) 15o. estado, $E = 0.05176$ eV; (c) 20o. estado, $E = 0.05201$ eV.

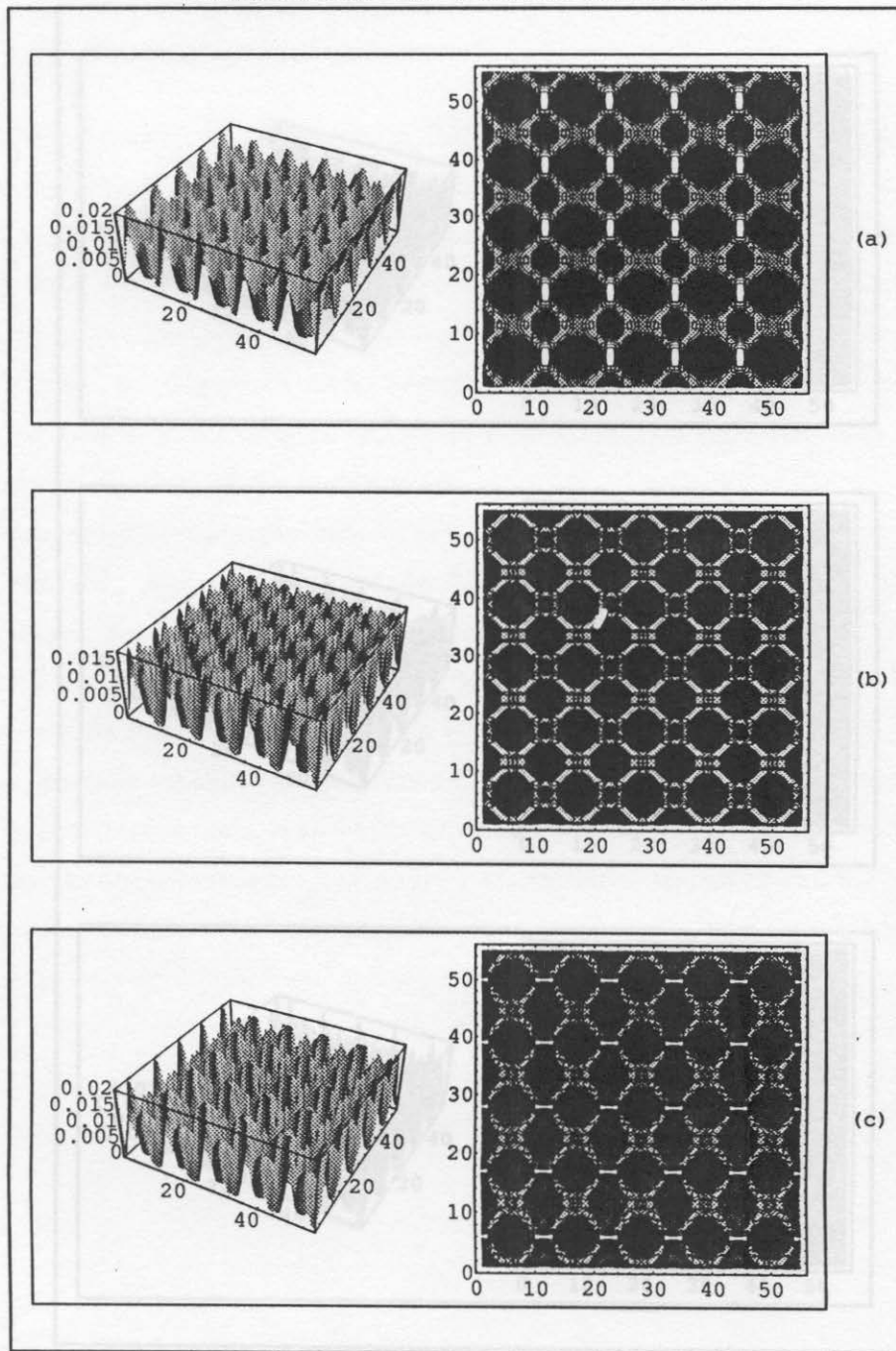


Figura 4.9: Densidade de probabilidade e respectivos contornos com $\phi/\phi_0 = 0.06$ para (a) 35o. estado, $E = 0.05440$ eV; (b) 55o. estado, $E = 0.07608$ eV; (c) 60o. estado, $E = 0.07629$ eV.

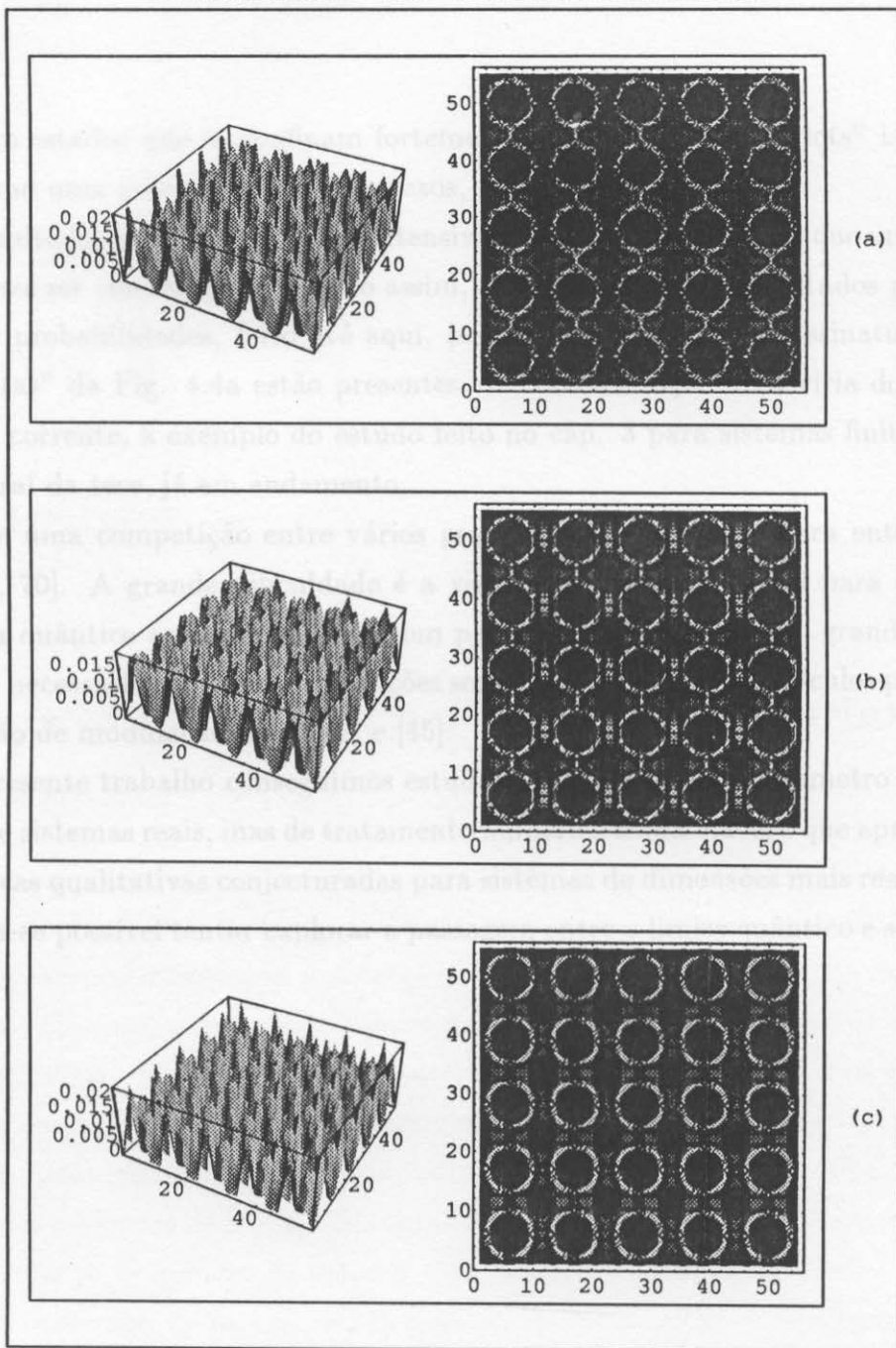


Figura 4.10: Densidade de probabilidade e respectivos contornos com $\phi/\phi_0 = 0.06$ para (a) 65o. estado, $E = 0.10314$ eV; (b) 70o. estado, $E = 0.10318$ eV; (c) 80o. estado, $E = 0.14320$ eV.

Temos também estados que se confinam fortemente em torno dos “antidots” isoladamente, 4.10c; bem como uma mistura desses dois casos, Fig. 4.10a.

Os resultados obtidos não foram extensivamente analisados sendo que uma varredura mais ampla deve ser considerada. Mesmo assim, o mapeamento destes estados por meio das densidades de probabilidades, feito até aqui, permite concluir que as assinaturas dos três tipos de “órbitas” da Fig. 4.4a estão presentes. A caracterização final viria do cálculo das densidades de corrente, a exemplo do estudo feito no cap. 3 para sistemas finitos. Essa é a extensão natural da tese, já em andamento.

Existe uma competição entre vários grupos contemporâneos para entender o problema [68, 69, 70]. A grande dificuldade é a viabilidade computacional para descrever do ponto de vista quântico os sistemas reais com parâmetros de rede muito grandes. Por essa razão torna-se necessário utilizar aproximações semi-clássicas [68] e/ou cálculos perturbativos na aproximação de modulação fraca [42] e [45].

No presente trabalho conseguimos estudar um sistema com parâmetro de rede bem menor que o de sistemas reais, mas de tratamento numérico ainda viável e que apresenta todas as características qualitativas conjecturadas para sistemas de dimensões mais realistas. Nesse contexto torna-se possível tentar explorar a passagem entre o limite quântico e semiclássico.

Capítulo 5

Conclusões

5.1 Observabilidade experimental da Borboleta de Hofstadter

A observação de espectros de Hofstadter defronta-se com uma série de dificuldades. A proposta inicial de Hofstadter [13], tendo em mente cristais reais, era inviável devido a necessidade de campos magnéticos inalcançáveis, dado o parâmetro de rede da ordem de 1 Å. Esses valores de campo magnético diminuem para $B \simeq 1\text{T}$ para os parâmetros de rede dos cristais artificiais. Essa perspectiva motivou a pesquisa experimental na área. Outros problemas, no entanto, precisam ser levados em conta. As densidades típicas dos gases de elétrons em heteroestruturas de alta mobilidade são $n_s \leq 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Com esse número podemos estimar o número de bandas do cristal 2D artificial preenchidas. Para um parâmetro de rede $a = 3000 \text{ Å}$, o número de estados disponíveis na 1ª zona de Brillouin, dado por $n_b = n_s a^2 / 2$ é da ordem de $n_{\text{bandas}} = 135$ para $n_s = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Podemos dizer que a energia de Fermi encontra-se no limite clássico de números quânticos altos, regime no qual as primeiras medidas de magnetotransporte em redes de “antidots” foram realizadas [18].

Podemos diminuir o número de bandas ocupadas em direção ao limite quântico com a diminuição da densidade de elétrons, que pode prejudicar o compromisso com a alta

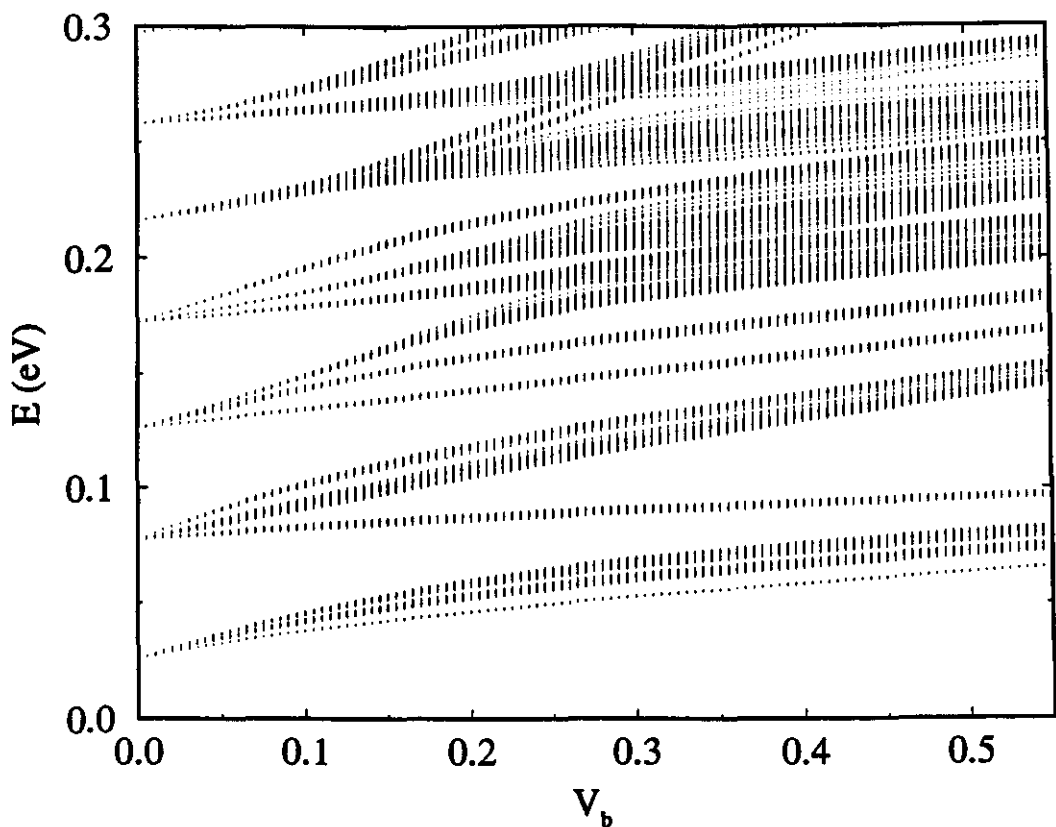


Figura 5.1: Espectro de energia em função da modulação de potencial para $\phi/\phi_0 = 3/4$.

mobilidade necessária. A outra alternativa é a diminuição do parâmetro de rede. De fato nessa direção concentram-se os esforços atuais e amostras de boa qualidade com $a \simeq 800 \text{ \AA}$ já foram obtidas [26] (para $n_s = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n_b \simeq 10$).

Dos resultados apresentados nessa tese, verificamos que qualquer mecanismo de alargamento dos níveis pode destruir o espectro, dados os valores extremamente pequenos dos “gaps” entre as subbandas de Landau. Mecanismos de espalhamento por fônons e impurezas podem ser controlados pela redução da temperatura de medida e constante aprimoramento da qualidade das amostras, respectivamente. Uma questão em aberto é a influência do mecanismo de espalhamento elétron-elétron que é inerente ao sistema.

Os primeiros resultados experimentais promissores são bastante recentes [26] e referem-se a cristais 2D com modulação de potencial sintonizável.

O referido experimento consiste de medidas de magnetoresistividade, utilizando o efeito de Shubnikov-de Haas: é sabido que a depopulação de níveis de Landau leva a oscilações na magnetoresistividade [9].

T. Schloesser e colaboradores [26] procuraram oscilações adicionais devidas à estrutura interna dos níveis de Landau, modificando concomitantemente a modulação de potencial. Encontraram, de fato, indícios dessas oscilações adicionais em número compatível com o esperado para os valores de campo magnético (ϕ/ϕ_0) , compatíveis com o regime experimental de modulação fraca. Testamos qualitativamente essa idéia com o sistema descrito no cap. 2. Fixamos o valor de fluxo de campo magnético na célula unitária da superrede lateral em $\phi'/\phi_0 = n^2\phi/\phi_0 = 3/4$, variando a modulação de potencial V_b , Fig. 5.1.

De fato, observamos que para $V_b = 0$ temos os níveis de Landau igualmente espaçados, que passam a apresentar estrutura interna a medida que V_b aumenta, com $p = 3$ número de subbandas associadas a cada nível de Landau, como era de se esperar. Nota-se que para $V_b < 0.1$ eV (modulação fraca no nosso caso) todas as bandas estão separadas e com a estrutura interna claramente resolvidas. A forte mistura para modulações mais fortes torna impossível atender a essa condição necessária de resolução das bandas de Landau para poder interpretar as medidas do efeito de Shubnikov de Haas.

Esse nosso resultado confirma a plausibilidade das observações experimentais, dando indicações também de porque o mapeamento de toda “Borboleta” seria difícil: a resolução da estrutura autosimilar varia com o índice do nível de Landau correspondente. Desse modo é necessária uma sintonia do campo magnético para que a depopulação de uma dada banda de Landau corresponda a um intervalo de valores de fluxo $\phi/\phi_0 = p/q$, no qual as p subbandas sejam bem resolvidas.

5.2 Comentários Finais

O presente trabalho contribui para o entendimento qualitativo de espectros autosimilares de energia em cristais artificiais bidimensionais. Com o modelo desenvolvido pudemos abordar questões importantes como a transição entre regimes de modulação e os diferentes efeitos de borda. Embora ainda longe de poder fazer previsões quantitativas dentro das possibilidades computacionais consideradas, o presente modelo é apropriado para explorar várias possibilidades de extensão, que são de relevância para o tema:

- inclusão de efeitos de desordem,
- efeitos de interação elétron-elétron no limite de baixa densidade,
- cálculo explícito da magnetocondutividade e comparação com resultados semiclássicos.

Alguns dos resultados apresentados aqui estão publicados [25, 71] e outros dão suporte a dois artigos em elaboração.

Apêndice A

Translações Magnéticas

M. Kohmoto, em *Annals of Physics* **160**, 343 (1985).

Elétrons de Bloch em campo magnético uniforme

Equação de Schrödinger para elétrons não interagentes confinados bidimensionalmente e sujeitos a campo magnético uniforme perpendicular ao plano.

Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}\Psi = \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(x, y) \right] \Psi = E\Psi, \quad (\text{A.1})$$

com

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla, \quad \mathbf{A} \text{ localizado no plano } (x, y). \quad (\text{A.2})$$

$U(x, y)$ é periódico nas direções x e y :

$$U(x + a, y) = U(x, y + b) = U(x, y). \quad (\text{A.3})$$

O sistema é invariante sob translações por a ao longo de ambas direções, x e y .

A palavra “sistema” está empregada aqui significando um plano bidimensional de cargas (elétrons) na ausência de campo magnético.

Entretanto, o Hamiltoniano não é invariante sob estas translações. A razão para isto é que o vetor potencial $\mathbf{A}$ não é constante apesar do fato do campo magnético ser constante.

Assim, uma transformação de calibre é necessária para manter o Hamiltoniano invariante.

Definição de uma rede: seja $\mathbf{R}$ um vetor da rede de Bravais,

$$\mathbf{R} = n\mathbf{a} + m\mathbf{b}, \quad n \text{ e } m \text{ inteiros.} \quad (\text{A.4})$$

Para cada vetor $\mathbf{R}$ da rede de Bravais nos definimos um operador de translação, T_R o qual, operando sobre uma função suave, $f(\mathbf{r})$, desloca o argumento por $\mathbf{R}$:

$$T_R f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (\text{A.5})$$

Este operador é explicitamente escrito como

$$T_R = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{R} \cdot \mathbf{p} \right\}. \quad (\text{A.6})$$

Se T_R é aplicado ao Hamiltoniano acima, o potencial $U(\mathbf{r})$ é mantido invariante.

Se $\mathbf{A}=0$, nós temos uma forma explícita do teorema de Bloch para nosso sistema. Entretanto, o vetor potencial é transformado para $\mathbf{A}(\mathbf{r}+\mathbf{R})$, que geralmente não é igual a $\mathbf{A}(\mathbf{r})$.

Consideremos os operadores de translação magnética,

$$\begin{aligned} \hat{T}_R &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{R} \cdot \left[\mathbf{p} + \frac{e}{2} (\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \right] \right\} \\ &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{R} \cdot \mathbf{p} + \frac{ie}{2\hbar} \mathbf{R} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{R}) \right\} \\ &= \underbrace{\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{R} \cdot \mathbf{p} \right\}}_{T_R} \exp \left\{ \frac{ie}{2\hbar} \mathbf{R} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

$$\hat{T}_R = T_R \exp \left\{ \frac{ie}{2\hbar} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{r} \right\}. \quad (\text{A.8})$$

Se tomamos o calibre simétrico, $\mathbf{A}=(\mathbf{B} \times \mathbf{r})/2$, $\hat{T}_R$ mantém o Hamiltoniano invariante:

$$[\hat{T}_R, \mathcal{H}] = 0, \quad (\text{A.9})$$

e agora estamos a procura de autoestados que diagonalizem simultâneamente $\hat{T}_R$ e $\mathcal{H}$.

Entretanto, note que as translações magnéticas não comutam uma com a outra em geral, já que

$$\hat{T}_a \hat{T}_b = \exp(-2\pi i \phi) \hat{T}_b \hat{T}_a, \quad (\text{A.10})$$

onde $\phi = (eB/h)ab$ é o número de fluxo magnético na célula unitária.

$$\frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{2}B \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 0 & 0 & 0 \\ x & y & 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{2}B [x\vec{j} - y\vec{i}] \quad (\text{A.11})$$

$$= \frac{1}{2}B(-y, x, 0) \implies \text{No calibre simétrico.} \quad (\text{A.12})$$

Voltando para $\hat{T}_R$ então teremos,

$$\hat{T}_R = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (-i\hbar) \mathbf{R} \cdot \nabla \right\} \exp \left\{ \frac{-ie}{\hbar} \mathbf{R} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \right\} \quad (\text{A.13})$$

Agora trocamos $\hat{T}_R$ por $\hat{T}_a$ e $\hat{T}_b$:

$$\hat{T}_a = \exp \{ \mathbf{a} \cdot \nabla \} \exp \left\{ \frac{-ieB}{2\hbar} \mathbf{a} \cdot (x\vec{j} - y\vec{i}) \right\} \quad (\text{A.14})$$

$$\hat{T}_a = \exp \left\{ a \frac{\partial}{\partial x} \right\} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} eBay \right\}. \quad (\text{A.15})$$

O mesmo cálculo leva a $\hat{T}_b$:

$$\hat{T}_b = \exp \left\{ b \frac{\partial}{\partial y} \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{2\hbar} eBbx \right\}. \quad (\text{A.16})$$

Finalmente,

$$\hat{T}_a \hat{T}_b = \exp \left\{ a \frac{\partial}{\partial x} \right\} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} eBay \right\} \exp \left\{ b \frac{\partial}{\partial y} \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{2\hbar} eBbx \right\} \quad (\text{A.17})$$

$$\hat{T}_b \hat{T}_a = \exp \left\{ b \frac{\partial}{\partial y} \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{2\hbar} eBbx \right\} \exp \left\{ a \frac{\partial}{\partial x} \right\} \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} eBay \right\} \quad (\text{A.18})$$

Usando o fato de que

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]}, \quad (\text{A.19})$$

reescrevemos as equações acima como

$$\hat{T}_a \hat{T}_b = \hat{T}_b \hat{T}_a \exp \left\{ \left[a \frac{\partial}{\partial x} + \frac{i}{2\hbar} eB a y, b \frac{\partial}{\partial y} - \frac{i}{2\hbar} eB b x \right] \right\} \quad (\text{A.20})$$

Exemplo da utilização do operador acima numa função Ψ :

$$\hat{T}_a \hat{T}_b \Psi = \hat{T}_b \hat{T}_a \exp \{ [\dots, \dots] \} \Psi = [\dots, \dots] \Psi, \quad (\text{A.21})$$

$$\begin{aligned} &= \left[\left(a \frac{\partial}{\partial x} + \frac{i}{2\hbar} eB a y \right) \left(b \frac{\partial}{\partial y} - \frac{i}{2\hbar} eB b x \right) - \left(b \frac{\partial}{\partial y} - \frac{i}{2\hbar} eB b x \right) \left(a \frac{\partial}{\partial x} + \frac{i}{2\hbar} eB a y \right) \right] \Psi \\ &= \left\{ \left(ab \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - ab \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi - \frac{ieB ab}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial x} (x\Psi) + \frac{ieB y ab}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial y} \Psi + \frac{e^2 B^2 ab xy}{4\hbar^2} \Psi - \right. \\ &\quad \left. - \frac{ieB ab}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial y} (y\Psi) + \frac{ieB x ab}{2\hbar} \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \frac{e^2 B^2 ab xy}{4\hbar^2} \Psi \right\} \\ &\quad \left[a \frac{\partial}{\partial x} + \frac{i}{2\hbar} eB a y, b \frac{\partial}{\partial y} - \frac{i}{2\hbar} eB b x \right] \Psi = \frac{-ieB}{\hbar} ab \Psi = -i \frac{2\pi}{h} eB ab \Psi. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Assim, temos de fato a seguinte transformação:

$$\hat{T}_a \hat{T}_b = \hat{T}_b \hat{T}_a \exp \{ -2\pi i \phi \}, \quad \phi = \frac{eB}{h} ab, \quad (\text{A.23})$$

onde $\phi = (eB/h) ab$ é o número de fluxo magnético na célula unitária.

Quando ϕ for um número racional, $\phi = p/q$, teremos um conjunto de translações que comutam um com o outro. Tomamos uma célula unitária aumentada (célula unitária magnética) com múltiplo inteiro de fluxos magnéticos atravessando-a.

Exemplo 1: se os vetores da rede de Bravais são do tipo:

$$\mathbf{R}' = n(q\mathbf{a}) + m\mathbf{b}, \quad (\text{A.24})$$

$$\phi' = \frac{eB}{h} (qa) b, \quad (\text{A.25})$$

portanto, se

$$\frac{eB}{h} ab = p/q \longrightarrow \phi' = p \quad (\text{A.26})$$

e

$$\hat{T}_a \hat{T}_b = \hat{T}_b \hat{T}_a \quad \text{para } \mathbf{R}' \quad (\text{A.27})$$

Exemplo 2: para vetores $\mathbf{R}' = n\mathbf{a} + mq'\mathbf{b}$, equivalente ao exemplo 1:

se

$$\mathbf{R}' = nq\mathbf{a} + mq'\mathbf{b}, \quad \phi = \frac{eB}{h} qq' (ab) \quad (\text{A.28})$$

e se

$$\frac{eB}{h} ab = p/q \longrightarrow \phi' = pq' \quad (\text{A.29})$$

$$\mathbf{R} = n\mathbf{a} + mq\mathbf{b} \longrightarrow \phi' = \frac{eB}{h} q ab \quad (\text{A.30})$$

$$\rightarrow \frac{eB}{h} ab = p/q \longrightarrow \phi' = p \quad (\text{A.31})$$

$$\mathbf{R} = nq\mathbf{a} + m\mathbf{b} \quad (\text{A.32})$$

$$\hat{T}_{qa} = \exp \{ qa \partial_x \} \quad (\text{A.33})$$

$$\hat{T}_b = \exp \{ b \partial_y \} \exp \left\{ i \frac{eB}{h} Bx \right\} \quad (\text{A.34})$$

No calibre de Landau as contas se simplificam um pouco mais, como veremos a seguir.

Calibre de Landau: $\mathbf{A} = B(0, x, 0)$

$$\nabla \times \mathbf{A} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ 0 & Bx & 0 \end{vmatrix} = B_{\vec{k}} \quad \text{dir. } \mathbf{z} \quad (\text{A.35})$$

Retomando $\hat{T}_R$:

$$\hat{T}_R = T_R \exp \left\{ \frac{ie}{h} \mathbf{R} \cdot \mathbf{A} \right\}, \quad \text{se } \mathbf{R} = n\mathbf{a} + m\mathbf{b}, \quad (\text{A.36})$$

$$\hat{T}_R = T_R \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar} mbBx \right\} \quad (\text{A.37})$$

$$\hat{T}_a = \exp \left\{ a \frac{\partial}{\partial x} \right\} \quad (\text{A.38})$$

$$\hat{T}_b = \exp \left\{ b \frac{\partial}{\partial y} \right\} \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar} bBx \right\} \quad (\text{A.39})$$

“Calibre” de Landau implica em “crescimento” da célula unitária magnética em apenas uma direção (y).

$$\hat{T}_a \hat{T}_b = \exp \left\{ a \frac{\partial}{\partial x} \right\} \exp \left\{ b \frac{\partial}{\partial y} \right\} \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar} bBx \right\} \quad (\text{A.40})$$

$$\hat{T}_b \hat{T}_a = \exp \left\{ b \frac{\partial}{\partial y} \right\} \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar} bBx \right\} \exp \left\{ a \frac{\partial}{\partial x} \right\} \quad (\text{A.41})$$

Novamente,

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]}, \quad (\text{A.42})$$

assim,

$$\hat{T}_a \hat{T}_b = \hat{T}_b \hat{T}_a \exp \left\{ \left[a \frac{\partial}{\partial x}, b \frac{\partial}{\partial y} + \frac{ie}{\hbar} Bbx \right] \right\}, \quad (\text{A.43})$$

que aplicando em Ψ fornece:

$$\begin{aligned} \left[a \frac{\partial}{\partial x}, b \frac{\partial}{\partial y} + \frac{ie}{\hbar} Bbx \right] \Psi &= \left[ab \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \Psi + \frac{ieB}{\hbar} ab \frac{\partial}{\partial x} (x\Psi) - ab \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \frac{ieB}{\hbar} abx \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right] \\ &= \frac{ieB}{\hbar} \left(\Psi + x \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) ab \\ \left[a \frac{\partial}{\partial x}, b \frac{\partial}{\partial y} + \frac{ie}{\hbar} Bbx \right] \Psi &= \frac{ieB}{\hbar} ab \Psi \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

Mesmo argumento: subconjunto de translações para $2\pi i\phi$:

$$2\pi i\phi = 2\pi \frac{ieB}{\hbar} ab = 2\pi i p/q, \quad (\text{A.45})$$

a presença do campo magnético provoca translações extras apenas na direção y .

Apêndice B

Hamiltoniano tight-binding para um sistema 2D

Hamiltoniano tight-binding para uma rede quadrada de espaçamento a e um orbital tipo s por sítio (todos os átomos-sítios iguais):

$$H = \sum_{n,m} [\epsilon_{n,m} |n, m\rangle \langle n, m| + V |n, m\rangle \langle n+1, m| + V |n, m\rangle \langle n-1, m| + \quad (B.1)$$

$$+ V |n, m\rangle \langle n, m+1| + V |n, m\rangle \langle n, m-1|] \quad (B.2)$$

n : índice para $x = na$

m : índice para $y = ma$

Obs.: são levadas em conta somente interações entre los. vizinhos.

Função de onda:

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{n,m} e^{ik_x n} e^{ik_y m} |n, m\rangle \quad (B.3)$$

Equação de Schrödinger: $H\Psi_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}\Psi_{\mathbf{k}}$

$$H\Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{n,m} \sum_{n',m'} \{ \epsilon_{n,m} |n, m\rangle \langle n, m| n', m'\rangle + V [|n, m\rangle \langle n+1, m| n', m'\rangle + \quad (B.4)$$

$$+ |n, m\rangle \langle n-1, m | n', m'\rangle + |n, m\rangle \langle n, m+1 | n', m'\rangle + \quad (\text{B.5})$$

$$+ |n, m\rangle \langle n, m-1 | n', m'\rangle]] \otimes \exp \{ik_x n'\} \exp \{ik_y m'\} \quad (\text{B.6})$$

$$H\Psi_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} \sum_{n,m} \exp \{ik_x n'\} \exp \{ik_y m'\} \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned} H\Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{n,m} \sum_{n',m'} \{ \epsilon_{n,m} |n, m\rangle \delta_{nn'} \delta_{mm'} + V [|n, m\rangle \delta_{n+1,n'} \delta_{mm'} + |n, m\rangle \delta_{n-1,n'} \delta_{mm'} + \\ |n, m\rangle \delta_{nn'} \delta_{m+1,m'} + |n, m\rangle \delta_{nn'} \delta_{m-1,m'}] \} \otimes \exp \{ik_x n'\} \exp \{ik_y m'\} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Elementos de matriz $\longrightarrow$ matriz a ser diagonalizada.

$$\langle \Psi_{\mathbf{k}} | H - E_{\mathbf{k}} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle = 0 \quad (\text{B.9})$$

com

$$\langle \Psi_{\mathbf{k}} | = \sum_{n,m} e^{-ik_x n} e^{-ik_y m} \langle n, m |, \quad (\text{B.10})$$

assim

$$\begin{aligned} \sum_{n,m} \sum_{n',m'} \{ (\epsilon_{n',m'} - E_{\mathbf{k}}) \langle n, m | n', m'\rangle e^{ik_x(n'-n)} e^{ik_y(m'-m)} + \\ V \langle n, m | n' - 1, m'\rangle e^{ik_x(n'-n)} e^{ik_y(m'-m)} + V \langle n, m | n' + 1, m'\rangle e^{ik_x(n'-n)} e^{ik_y(m'-m)} + \\ V \langle n, m | n', m' - 1\rangle e^{ik_x(n'-n)} e^{ik_y(m'-m)} + V \langle n, m | n', m' + 1\rangle e^{ik_x(n'-n)} e^{ik_y(m'-m)} \} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n, m | n', m'\rangle &= \delta_{nn';mm'} \longrightarrow \text{elemento diagonal} \\ \langle n, m | n' - 1, m'\rangle &= \delta_{nn'-1;mm'} \\ \langle n, m | n' + 1, m'\rangle &= \delta_{nn'+1;mm'} \\ \langle n, m | n', m' - 1\rangle &= \delta_{nn';mm'-1} \\ \langle n, m | n', m' + 1\rangle &= \delta_{nn';mm'+1} \end{aligned}$$

O fechamento da equação anterior leva então a:

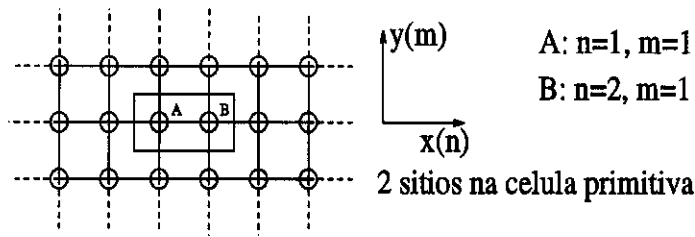


Figura B.1: Célula unitária formada por dois sítios.

$$\sum_{n,m} \left\{ (\epsilon_{n,m} - E_{\mathbf{k}}) + V_{\substack{n,n-1 \\ m,m}} e^{ik_x a} + V_{\substack{n,n+1 \\ m,m}} e^{-ik_x a} + V_{\substack{n,n \\ m,m-1}} e^{ik_y a} + V_{\substack{n,n \\ m,m+1}} e^{-ik_y a} \right\} = 0, \quad (\text{B.11})$$

onde n e m são índices dos sítios da célula primitiva.

Se tivermos apenas um sítio – $n = 1$ e $m = 1$ (outros índices n e m indicam os sítios de outras células primitivas):

$$\epsilon_{11} - E_{\mathbf{k}} + 2V \cos k_x a + 2V \cos k_y a = 0 \quad (\text{B.12})$$

Exemplo 1

Considerando uma célula unitária primitiva com mais átomos (2 sítios por célula unitária, Fig. B.1, rede redundante) teremos, por exemplo:

$$(\epsilon_{1,1} - E_{\mathbf{k}}) + V_{\substack{1,2 \\ 1,1}} e^{ik_x a} + V_{\substack{1,2 \\ 1,1}} e^{-ik_x a} + V_{\substack{1,1 \\ 1,1}} e^{ik_y a} + V_{\substack{1,1 \\ 1,1}} e^{-ik_y a} = 0, \quad (\text{B.13})$$

$$(\epsilon_{2,1} - E_{\mathbf{k}}) + V_{\substack{2,1 \\ 1,1}} e^{ik_x a} + V_{\substack{2,1 \\ 1,1}} e^{-ik_x a} + V_{\substack{2,2 \\ 1,1}} e^{ik_y a} + V_{\substack{2,2 \\ 1,1}} e^{-ik_y a} = 0, \quad (\text{B.14})$$

- traço sobre o número significa átomo de uma célula unitária no sentido negativo dos eixos coordenados.

- traço embaixo do número significa átomo de uma célula unitária no sentido positivo dos eixos coordenados.

$V_{\substack{1,2 \\ 1,1}}$: acopla o sítio 11 com o sítio 21 da célula imediatamente à esquerda.

$V_{\substack{1,2 \\ 1,1}}$: acopla o sítio 11 com o sítio 21 da mesma célula unitária e assim por diante.

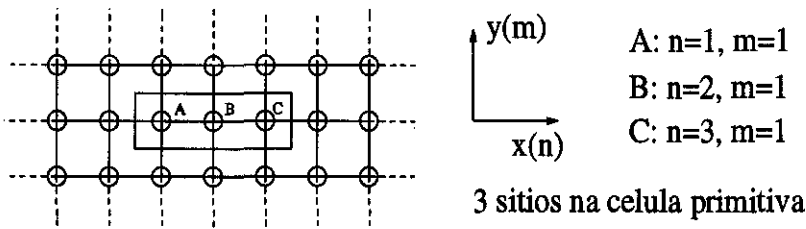


Figura B.2: Célula unitária formada por três sítios.

Essa matriz pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{11} - E_{\mathbf{k}} + 2V \cos k_y a & 2V \cos k_x a \\ 2V \cos k_x a & \epsilon_{21} - E_{\mathbf{k}} + 2V \cos k_y a \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{B.15})$$

★ Na direção y os sítios interagem (se acoplam) com sítios do mesmo tipo, por isso o termo de dispersão na diagonal.

★★ O fato de dos termos em cosseno aparecerem nos elementos da diagonal ocorre porque a célula unitária na direção y tem apenas um sítio atômico.

Exemplo 2

Célula unitária com três átomos (sítios) na direção x , Fig. B.2:

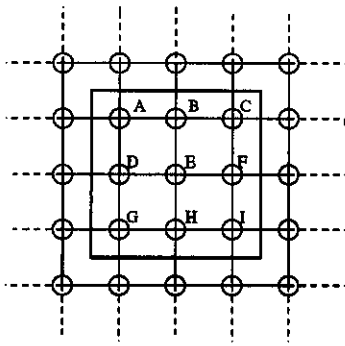
Repetindo o procedimento utilizado no exemplo anterior obteremos uma matriz do tipo

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{11} - E_{\mathbf{k}} + 2V \cos k_y a & V e^{-ik_x a} & V e^{ik_x a} \\ V e^{ik_x a} & \epsilon_{21} - E_{\mathbf{k}} + 2V \cos k_y a & V e^{-ik_x a} \\ V e^{-ik_x a} & V e^{ik_x a} & \epsilon_{31} - E_{\mathbf{k}} + 2V \cos k_y a \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{B.16})$$

◇ Os termos em cosseno na diagonal se desmembram quando a célula unitária “cresce” de maneira análoga na direção y .

Veremos agora um exemplo de uma célula unitária redundante com crescimento simétrico para ambos os lados.

Exemplo 3



$$A: n=1, m=1$$

$$B: n=2, m=1$$

$$C: n=3, m=1$$

$$D: n=1, m=2$$

$$E: n=2, m=2$$

$$F: n=2, m=2$$

$$G: n=1, m=3$$

$$H: n=2, m=3$$

$$I: n=3, m=3$$

$$y(m)$$

$$x(n)$$

9 sítios na célula primitiva

Figura B.3: Célula unitária formada por nove sítios.

Célula unitária primitiva formada por 9 átomos-sítios-iguais (redundante), de acordo com a figura B.3:

$$A + B + C + D + E + F + G + H + I \quad (B.17)$$

$$A = \left\{ (\epsilon_{1,1} - E_{\mathbf{k}}) + V_{1,3} e^{ik_x a} + V_{1,2} e^{-ik_x a} + V_{1,1} e^{ik_y a} + V_{1,1} e^{-ik_y a} \right\} \quad (B.18)$$

$$B = \left\{ (\epsilon_{2,1} - E_{\mathbf{k}}) + V_{2,1} e^{ik_x a} + V_{2,3} e^{-ik_x a} + V_{2,2} e^{ik_y a} + V_{2,2} e^{-ik_y a} \right\} \quad (B.19)$$

$$C = \left\{ (\epsilon_{3,1} - E_{\mathbf{k}}) + V_{3,2} e^{ik_x a} + V_{3,1} e^{-ik_x a} + V_{3,3} e^{ik_y a} + V_{3,3} e^{-ik_y a} \right\} \quad (B.20)$$

$$D = \left\{ (\epsilon_{1,2} - E_{\mathbf{k}}) + V_{1,3} e^{ik_x a} + V_{1,2} e^{-ik_x a} + V_{1,1} e^{ik_y a} + V_{1,1} e^{-ik_y a} \right\} \quad (B.21)$$

$$E = \left\{ (\epsilon_{2,2} - E_{\mathbf{k}}) + V_{2,1} e^{ik_x a} + V_{2,3} e^{-ik_x a} + V_{2,2} e^{ik_y a} + V_{2,2} e^{-ik_y a} \right\} \quad (B.22)$$

$$F = \left\{ (\epsilon_{3,2} - E_{\mathbf{k}}) + V_{3,2} e^{ik_x a} + V_{3,1} e^{-ik_x a} + V_{3,3} e^{ik_y a} + V_{3,3} e^{-ik_y a} \right\} \quad (B.23)$$

$$G = \left\{ (\epsilon_{1,3} - E_{\mathbf{k}}) + V_{1,3} e^{ik_x a} + V_{1,2} e^{-ik_x a} + V_{1,1} e^{ik_y a} + V_{1,1} e^{-ik_y a} \right\} \quad (B.24)$$

$$H = \left\{ (\epsilon_{2,3} - E_{\mathbf{k}}) + V_{2,1} e^{ik_x a} + V_{2,3} e^{-ik_x a} + V_{2,2} e^{ik_y a} + V_{2,2} e^{-ik_y a} \right\} \quad (B.25)$$

$$I = \left\{ (\epsilon_{3,3} - E_{\mathbf{k}}) + V_{3,2} e^{ik_x a} + V_{3,1} e^{-ik_x a} + V_{3,3} e^{ik_y a} + V_{3,3} e^{-ik_y a} \right\} \quad (B.26)$$

que reescrito na forma determinantal fornece:

$\epsilon_{11} - E_{\mathbf{k}}$	$V_{1,1} e^{-ik_x a}$	$V_{1,\bar{3}} e^{ik_x a}$	$V_{1,1} e^{ik_y a}$	0	0	$V_{1,1} e^{-ik_y a}$	0	0
$V_{2,1} e^{ik_x a}$	$\epsilon_{21} - E_{\mathbf{k}}$	$V_{2,3} e^{-ik_x a}$	0	$V_{2,2} e^{ik_y a}$	0	0	$V_{2,2} e^{-ik_y a}$	0
$V_{3,1} e^{-ik_x a}$	$V_{3,\bar{2}} e^{ik_x a}$	$\epsilon_{31} - E_{\mathbf{k}}$	0	0	$V_{3,3} e^{ik_y a}$	0	0	$V_{3,3} e^{-ik_y a}$
$V_{2,1} e^{-ik_y a}$	0	0	$\epsilon_{12} - E_{\mathbf{k}}$	$V_{1,2} e^{-ik_x a}$	$V_{1,\bar{3}} e^{ik_x a}$	$V_{1,1} e^{ik_y a}$	0	0
0	$V_{2,2} e^{-ik_y a}$	0	$V_{2,\bar{1}} e^{ik_x a}$	$\epsilon_{22} - E_{\mathbf{k}}$	$V_{2,2} e^{-ik_x a}$	0	$V_{2,2} e^{ik_y a}$	0
0	0	$V_{3,3} e^{-ik_y a}$	$V_{3,1} e^{-ik_x a}$	$V_{3,\bar{2}} e^{ik_x a}$	$\epsilon_{23} - E_{\mathbf{k}}$	0	0	$V_{3,3} e^{ik_y a}$
$V_{1,1} e^{ik_y a}$	0	0	$V_{3,1} e^{-ik_y a}$	0	0	$\epsilon_{31} - E_{\mathbf{k}}$	$V_{1,2} e^{-ik_x a}$	$V_{1,\bar{3}} e^{ik_x a}$
0	$V_{2,\bar{1}} e^{ik_y a}$	0	0	$V_{2,2} e^{-ik_y a}$	0	$V_{2,\bar{1}} e^{ik_x a}$	$\epsilon_{32} - E_{\mathbf{k}}$	$V_{2,3} e^{-ik_x a}$
0	0	$V_{3,3} e^{ik_y a}$	0	0	$V_{3,3} e^{-ik_y a}$	$V_{3,1} e^{-ik_x a}$	$V_{3,\bar{2}} e^{ik_x a}$	$\epsilon_{33} - E_{\mathbf{k}}$

Neste apêndice mostramos como gerar a matriz de um Hamiltoniano TB com interação somente entre primeiros vizinhos. Para uma célula unitária simétrica redundante (todos os átomos-sítios-iguais) sua matriz correspondente é simétrica com os termos em k_x e k_y fora da diagonal principal. No caso de crescimento da célula unitária em uma direção somente, a matriz correspondente é simétrica e quadrada também, porém os termos na direção do crescimento se desacoplam da diagonal principal. Isso é importante com relação ao campo magnético pois no caso de se utilizar calibre em uma direção somente (calibre de Landau) pode-se fazer analogia entre os dois casos.

Isso encerra a parte referente ao cálculo das matrizes sem campo. No próximo apêndice, veremos como o campo magnético altera as matrizes deste apêndice (fusão do apêndice 1 com o apêndice 2).

Apêndice C

Campo Magnético + Hamiltoniano tight-binding 2D

Voltando à função de onda:

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{n,m} e^{ik_x n} e^{ik_y m} |n, m\rangle, \quad (\text{C.1})$$

$$e^{ik_x n} e^{ik_y m} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}, \quad \text{onde } \mathbf{R} = n\mathbf{a}_x + m\mathbf{a}_y \quad (\text{C.2})$$

ou seja, é o operador $T_R \equiv T_{nm}$. Na presença de campo magnético utilizamos então a hipótese de Peierls e

$$\tilde{\Psi} = \sum_{n,m} \hat{T}_{nm} |n, m\rangle, \quad (\text{C.3})$$

ou seja a nova periodicidade fica embutida na função de onda. Precisamos resolver novamente o problema:

$$H\tilde{\Psi}_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}\tilde{\Psi}_{\mathbf{k}}, \quad (\text{C.4})$$

pois a presença do campo magnético impôs novas condições periódicas para as possíveis soluções.

Utilizou-se $\hat{T}_{nm}$ no calibre de Landau já que o problema torna-se mais simples (um pouco) que no caso do calibre simétrico.

$$\hat{T}_{nm} = e^{ik_x n} e^{ik_y m} e^{i\frac{eB}{\hbar} a^2 nm} \quad (\text{lembramos que } x = na) \quad (\text{C.5})$$

$$\frac{eB}{\hbar} a^2 = 2\pi \frac{Ba^2}{\phi_0} = 2\pi \frac{\phi}{\phi_0} n, \quad (\text{C.6})$$

onde ϕ_0 é o *quantum* de fluxo magnético e Ba^2 é o fluxo magnético por célula unitária do plano. A invariância translacional só é garantida para o subconjunto de translações nos valores de B tais que

$$\frac{\phi}{\phi_0} = \frac{p}{q}, \quad \text{com } p, q \text{ inteiros} \quad (\text{C.7})$$

No presente trabalho, $q = n$. Nas notas utilizamos q por coerência com a literatura. De fato, trocamos

$$k_x \longrightarrow k_x \quad (\text{C.8})$$

$$k_y \longrightarrow k_y + 2\pi \frac{\phi}{\phi_0}. \quad (\text{C.9})$$

Substituindo “diretamente” na matriz obteremos

$$\begin{vmatrix} M_1 & Ve^{-ik_x a} & 0 & \dots & 0 & Ve^{ik_x a} \\ Ve^{ik_x a} & M_2 & Ve^{-ik_x a} & & 0 & 0 \\ 0 & Ve^{ik_x a} & M_3 & & \vdots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & M_{q-1} & Ve^{-ik_x a} \\ Ve^{-ik_x a} & 0 & \dots & 0 & Ve^{ik_x a} & M_q \end{vmatrix}, \quad (\text{C.10})$$

onde

$$M_n = (\epsilon_n - E_{\mathbf{k}}) + 2V \cos \left(k_y a + 2\pi \frac{p}{q} n \right). \quad (\text{C.11})$$

O aumento da célula unitária primitiva faz sentido porque de fato o efeito do campo magnético é restringir as operações que mantêm a invariância translacional. A transformação de Peierls na matriz anterior fornece elementos diagonais diferentes do caso sem campo: *ESPECTRO MAIS RICO*.

Esta é a origem da Borboleta de Hofstadter para uma rede quadrada com sítios iguais (estrutura eletrônica de apenas uma banda - célula unitária com apenas um sítio).

C.1 Extensão para a Superrede Lateral

Exemplo do caso estudado no capítulo 2 da tese. Célula unitária com modulação, 5x5 sítios da rede “hospedeira”. Neste caso, a matriz sem campo é:

$$\begin{vmatrix}
 \epsilon_0 & V_{-x} & 0 & 0 & V_{-x}^* & V_{-y} & 0 & \dots & 0 & V_{-y}^* & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 V_x & \epsilon_0 & V_{-x} & 0 & 0 & 0 & V_{-y} & 0 & \dots & 0 & V_{-y}^* & 0 & 0 & 0 \\
 0 & V_x & \epsilon_0 & V_{-x} & 0 & 0 & 0 & V_{-y} & 0 & \dots & 0 & V_{-y}^* & 0 & 0 \\
 0 & 0 & V_x & \epsilon_0 & V_{-x} & 0 & 0 & 0 & V_{-y} & 0 & \dots & 0 & V_{-y}^* & 0 \\
 V_x^* & 0 & 0 & V_x & \epsilon_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_{-y} & 0 & \dots & 0 & V_{-y}^* \\
 V_y & 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_0 & V_{-x} & 0 & 0 & 0 & V_{-y} & 0 & \dots & 0 \\
 0 & \ddots & 0 & \dots & & V_x & \ddots & V_{-x} & 0 & 0 & 0 & \ddots & & 0 \\
 \vdots & & & & & & \ddots & & \ddots & & & & & \vdots \\
 0 & & & & & & & & \ddots & \ddots & & & & V_{-y} \\
 V_y^* & 0 & & & & & & & \ddots & \epsilon_0 & V_{-x} & 0 & 0 & V_{-x}^* \\
 0 & V_y^* & 0 & & & & & & & V_x & \epsilon_0 & V_{-x} & 0 & 0 \\
 0 & 0 & V_y^* & 0 & & & & & & 0 & V_x & \epsilon_0 & V_{-x} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & V_y^* & 0 & & & & & 0 & 0 & V_x & \epsilon_0 & V_{-x} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & V_y^* & 0 & \dots & & V_y & V_x^* & 0 & 0 & V_x & \epsilon_0
 \end{vmatrix} = M_{B=0} \quad (C.12)$$

onde

$$V_x = V e^{ik_x a} \quad (C.13)$$

$$V_{-x} = V e^{-ik_x a} \quad (C.14)$$

$$V_y = V e^{ik_y a} \quad (C.15)$$

$$V_{-y} = V e^{-ik_y a}, \quad (C.16)$$

os termos em V_x e V_y marcados com “*” serão relocados de posição quando for introduzido campo magnético.

Os elementos emulando as colunas de potencial fisicamente são dispostos nos termos ϵ_0 . Para simplificar o programa de diagonalização gerado, estes elementos de modulação foram transferidos para os parâmetros de “hopping” V , sem alterar o resultado físico obtido no problema.

Com campo, a nova matriz a ser diagonalizada nada mais é que a matriz anterior repetida q -vezes. O efeito do campo magnético aparece no fator de fase, que no caso do calibre de Landau se dá na direção y somente. Assim, os termos em V_y vão conter informações sobre a nova simetria do cristal 2D. Essa nova matriz é:

$$\begin{vmatrix}
 & & V_{-x}^* & 0 & \dots & 0 & V_{-y}^* & 0 & \dots & 0 \\
 M_1 & & 0 & & & & \ddots & & \vdots & \\
 V_x^* & & & & & V_{-x}^* & & & V_{-y}^* & \\
 0 & & & M_2 & & & & & & \\
 \vdots & & V_x^* & & \ddots & & & & \vdots & \\
 V_y^* & & & & & & & & & \\
 0 & \ddots & & & & & & & & \\
 \vdots & & & & & & M_q & & & \\
 0 & \dots & & V_y^* & & & & & &
 \end{vmatrix} \cdot \quad (C.17)$$

$M_1, M_2, \dots, M_q$ são matrizes do tipo (C.12) despojadas agora dos elementos V_x^* e V_y^* . Estes mesmos elementos foram relocados para as posições indicadas na matriz (C.17) e estão relacionados com a nova célula unitária magnética, ou em outras palavras, pela nova periodicidade imposta pelo campo magnético. Os termos em $k_y + (2\pi p/q)n$ contêm a fase devido ao campo magnético no calibre de Landau. O número q determina o tamanho dessa nova matriz, que no caso será $25 \times q$. Quanto maior q , melhor a resolução da borboleta de Hofstadter porém os tempos computacionais aumentam consideravelmente.

Bibliografia

- [1] T. Ando *et al.* *Rev. Mod. Phys.*, **54**:437, (1982).
- [2] C. G. Grimes. *Surf. Sci.*, **73**:379, (1978).
- [3] V. Shikin Y. P. Monarkha. *Sov. J. Low Temp. Phys.*, **8**:279, (1982).
- [4] R. J. Nicholas *et al.* *Solid State Commun.*, **34**:51, (1980).
- [5] W. P. Kirk *et al.* *J. Vac. Sci. Tech.*, A **4**:2132, (1986).
- [6] E. E. Mendez. *Phys. Rev. Lett.*, **55**:2216, (1985).
- [7] F. F. Fang. *Surf. Sci.*, **305**:301, (1994).
- [8] G. M. Gusev *et al.* *JETP Lett.*, **39**:541, (1984).
- [9] P. Pietiläinen T. Chakraborty. *The Quantum Hall Effects Fractional and Integer*. 2nd. edition, Springer Verlag, Solid State Sciences, 1995.
- [10] D. Weiss *et al.* *Surf. Sci.*, **305**:408, (1994).
- [11] M. L. Roukes *et al.* *Phys. Rev. B*, **34**:633, (1989).
- [12] M. Ya. Azbel. *Sov. Phys. JETP*, **19**:634, (1964).
- [13] D. R. Hofstadter. *Phys. Rev. B*, **14**:2239, (1976).
- [14] D. Pfannkuche and R. R. Gerhardts. *Phys. Rev. B*, **46**:12 606, (1992).

- [15] D. Weiss *et al.* *Europhys. Lett.*, **8**:179, (1989).
- [16] R. R. Gerhardt, D. Weiss and K. von Klitzing. *Phys. Rev. Lett.*, **62**:1173, (1989).
- [17] R. W. Winkler *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **62**:1177, (1989).
- [18] D. Weiss *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **66**:2790, (1991).
- [19] R. Fleischmann *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **68**:1367, (1992).
- [20] G. Petschel and T. Geisel. *Phys. Rev. Lett.*, **71**:239, (1993).
- [21] I. V. Zozulenko, F. A. Maaø and E. H. Hauge. *Phys. Rev. B*, **51**:7058, (1995).
- [22] P. G. Harper. *Proc. Roy. Soc. London Sect. A*, **68**:874, (1955).
- [23] A. H. MacDonald. *Phys. Rev. B*, **28**:6713, (1983).
- [24] H. W. Newmann and A. Rauh. *Phys. Stat Sol. (b)*, **96**:233, (1979).
- [25] M. A. Andrade Neto and P. A. Schulz. *Phys. Rev. B*, **52**:14 093, (1995).
- [26] T. Schlösser *et al.* *Europhys. Lett.*, **33**:683, (1996).
- [27] D. Weiss *et al.* *Appl. Phys Lett.*, **58**:2960, (1991).
- [28] R. A. Morrow. *Phys. Rev. B*, **35**:8074, (1987).
- [29] W. Kohn, J. M. Luttinger. *Phys. Rev. B*, **97**:869, (1955).
- [30] D. J. BenDaniel and C. B. Duke. *Phys. Rev.*, **152**:683, (1966).
- [31] G. W. Bryant. *Phys. Rev. B*, **40**:1620, (1989).
- [32] R. Peierls. *Z. Phys.*, **80**:763, (1933).
- [33] J. C. Slater. *Phys. Rev.*, **76**:1592, (1949).
- [34] G. H. Wannier. *Phys. Rev.*, **52**:191, (1937).

- [35] J. M. Luttinger. *Phys. Rev.*, **84**:814, (1952).
- [36] W. Kohn. *Phys. Rev.*, **115**:1460, (1959).
- [37] E. I. Blount. *Phys. Rev.*, **126**:1636, (1962).
- [38] J. Zak. *Phys. Rev.*, **136**:A776, (1964).
- [39] Y. Hasegawa *et al.* *Phys. Rev. B*, **41**:9174, (1990).
- [40] M. Kohmoto. *Annals of Physics*, **160**:343, (1985).
- [41] E. H. Hauge J. Skajes and G. Schön. *Phys. Rev. B*, **50**:8636, (1994).
- [42] R. R. Gerhardts *et al.* *Phys. Rev. B*, **43**:5192, (1991).
- [43] G. M. Oberamir H.-J. Schellnhuber and A. Rauph. *Phys. Rev. B*, **23**:5191, (1981).
- [44] A. H. McDonald. *Phys. Rev. B*, **28**:6713, (1983).
- [45] G. Petschel and T. Geisel. *Phys. Rev. Lett.*, **71**:239, (1993).
- [46] O. Köhn *et al.* *Phys. Rev. B*, **47**:13019, (1993).
- [47] H. Silberbauer. *J. Phys. Condens. Matter*, **4**:7355, (1992).
- [48] H. J. Fishbeck. *Phys. Status Solidi*, **38**:11, (1970).
- [49] G. Nenciu. *Rev. Mod. Phys.*, **63**:91, (1991).
- [50] C. G. Darwin. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, **27**:86, (1930).
- [51] R. B. Dingle. *Proc. R. Soc. London*, Ser A **212**:47, (1952).
- [52] R. B. Dingle. *Proc. R. Soc. London*, Ser A **219**:463, (1953).
- [53] Marco Robnik. *J. Phys. A*, **19**:3619, (1986).
- [54] P. A. Maksym and Tapash Chakraborty. *Phys. Rev. Lett.*, **65**:108, (1990).

- [55] R. C. Ashoori *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **71**:613, (1993).
- [56] C. S. Lent. *Phys. Rev. B*, **43**:4179, (1991).
- [57] U. Merkt. *Phys. Bl.*, **47**:591, (1991).
- [58] A. Lorke *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **64**:2559, (1990).
- [59] A. Lorke *et al.* *Superlatt. Microstruct.*, **9**:103, (1991).
- [60] D. Weiss in *Festkoerperprobleme: Advances in Solid State Physics*. edited by U. Rössler (Vieweg, Braunschweig, 1991), Vol. 31, p. 341.
- [61] U. Sivan Y. Imry and C. Hartzstein. *Phys. Rev. B*, **39**:1242, (1989).
- [62] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics*. Pergamon Press, Oxford, 1965.
- [63] M. V. Berry. *Annals of Physics*, **131**:163, (1981).
- [64] S. Ishizaka *et al.* *Phys. Rev. B*, **51**:9881, (1995).
- [65] M. C. Gutzwiller. *J. Math. Phys.*, **12**:343, (1971).
- [66] M. C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer, New York, 1990.
- [67] Mahito Kohmoto. *Phys. Rev. B*, **39**:11 943, (1989).
- [68] S. Uryu and T. Ando. *Phys. Rev. B*, **53**:13 613, (1996).
- [69] F. A. Maaø I. V. Zozulenکو and E. H. Hauge. *Phys. Rev. B*, **53**:7975, (1996).
- [70] M. Suhrke P. Rotter and U. Roessler. *Phys. Rev. B*, **54**:4452, (1996).
- [71] M. A. Andrade Neto and P. A. Schulz. *Braz. J. of Phys.*, **26**:318, (1996).