

este exemplar corresponde
à versão final da Tese
de Doutorado de Sr. Ivan F.
Costa, defendida e aprovada
pela Comissão Examinadora.
Campinas, 03 de dezembro 1996.
JAB

Interação coulombiana em
poço quântico sujeito
a campo magnético

Ivan F. Costa

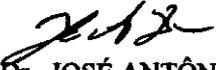
Orientador: Prof. José A. Brum

Tese apresentada ao Instituto de Física 'Gleb Wataghin'
da Universidade Estadual de Campinas como parte dos
requisitos à obtenção do título de Doutor em Ciências -
outubro de 1996

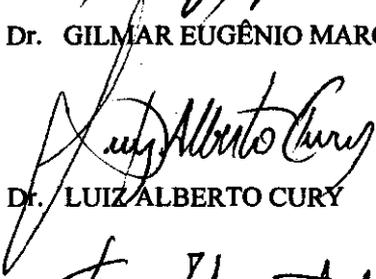
PARECER DE APROVAÇÃO
DEFESA DE TESE DE DOUTORADO
IVAN FERREIRA DA COSTA

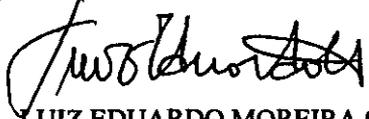
DATA: 29.11.96

BANCA EXAMINADORA:


- Prof. Dr. JOSÉ ANTÔNIO BRUM (Orientador)


- Prof. Dr. GILMAR EUGÊNIO MARQUES


- Prof. Dr. LUIZ ALBERTO CURY


- Prof. Dr. LUIZ EDUARDO MOREIRA CARVALHO DE OLIVEIRA


- Prof. Dr. MARCUS ALOÍZIO MARTINEZ DE AGUIAR

Dedico esta tese a minha filha Priscila

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, Prof. Brum, pela sugestão do trabalho e pelo apoio, participação e estímulo durante a elaboração desta tese. Aos Professores Maria Brazil, Fernando Iikawa e Peter Schulz, pelas discussões. Ao Armando, Márcia, Maria Ignês e Prof. Fernando Cerdeira, da secretaria de pós-graduação. Ao CNPq, pelo apoio financeiro e à Unicamp, por tudo a mais.

Agradeço também aos colegas da pós-graduação, pela companhia. Em particular ao Oliveira e aos que não mais se encontram aqui, mas que certamente encontrarei por aí, David, João Guilherme, Luiz Guilherme, Marcos Gomes, Marcos Araújo, Paulo de Tarso e Túlio.

Agradeço especialmente ao Dionei e família e ao Bernardo e Luciana, pela amizade durante estes anos. À Alexandra, pelo carinho. Aos meus pais, Nayr e Natan, pelo apoio incondicional que sempre me deram.

Finalmente agradeço ao pessoal do vôo-livre pelas horas de descanso e descontração que passamos juntos durante esta tese.

Pensamentos

”

Espero poder fazer da física não apenas uma profissão, mas fazê-la de uma forma apaixonada e infantil, como sonhei que fosse o trabalho de um cientista quando eu ainda era uma criança.

Ser um físico está fortemente relacionado com a curiosidade de entender como o mundo funciona a partir de observação cuidadosa, e fazê-lo não pelo título ou dinheiro, mas pelo prazer desprendido que isso gera na pessoa que pensa e aprende com esta observação.

Ciência não se faz apenas dentro dos nossos laboratórios e em frente aos nossos computadores, um cientista é aquele que vê o mundo de uma forma diferente, tentando por simples prazer aprender algo novo que até então tinha passado despercebido.

”

Resumo

O sistema estudado nesta tese consiste em um poço quântico de semiconductor submetido a um campo magnético aplicado paralelo ao plano do poço.

Neste sistema é excitado primeiramente um exciton. É feito um estudo do problema de dois corpos interagentes por força coulombiana sujeitos ao poço quadrado e ao campo magnético *no-plano*, onde se obtém, pela primeira vez, a dependência da energia do estado fundamental do exciton com o campo e com a largura e a altura do poço. A transição do exciton tridimensional ao exciton bidimensional também é estudada para poços profundos e rasos.

Na segunda parte, o exciton é substituído por uma impureza hidrogenóide colocada no centro do poço de potencial na aproximação parabólica. Para este caso é feito um estudo numérico dos níveis excitados perto do contínuo de energia, onde é esperada uma dinâmica clássica caótica para a impureza hidrogenóide que teve sua simetria quebrada pelo poço e pelo campo.

Abstract

We investigate a semiconductor quantum well subject to a magnetic field applied parallel to the plane of the well.

In this system we first studied an exciton. The two body problem with two interacting particules were subjected to a square quantum well and an in-plane magnetic field, in which we obtained, for the first time, the dependence of the excitonic ground state energy with the field and the width and height of the well. The transition from 3-dimensional to 2-dimensional magneto-exciton was also studied for shallow and deep quantum wells.

In the second part, the exciton was replaced by a hydrogenic impurity in the center of a parabolic quantum well. For this case a numerical study was performed for the excited energy states close to the ionization threshold, where a classic chaotic behavior for the hydrogenic impurity was expected to arise from the broken symmetry by the well and the field.

Conteúdo

1	Introdução	9
1.1	Teoria básica	15
1.1.1	Poço quântico de potencial	15
1.1.2	Campo magnético	24
1.1.3	Interação coulombiana	24
1.1.4	Interação coulombiana em campo magnético	25
2	Quantização do centro-de-massa de exciton em poço quântico sujeito a campo magnético perpendicular à direção de cres- cimento	26
2.1	Introdução	27
2.2	Teoria	28
2.3	Resultados e discussões	32
2.3.1	Transição 3D-2D do exciton magnético	37
2.4	Conclusões e perspectivas	44
3	Caos quântico em impureza hidrogenóide magnética sujeita a confinamento parabólico	46
3.1	Introdução	46
3.2	Teoria	49
3.2.1	O operador hamiltoniano	50

	8
3.2.2 A escolha da base	51
3.2.3 Os elementos de matriz	52
3.3 Resultados	55
3.4 Conclusões	63
4 Conclusão Final	64
A Elementos de matriz	71

Capítulo 1

Introdução

A criação do conceito¹ e desenvolvimento² das técnicas de crescimento de heteroestruturas de semicondutores abriram novas perspectivas na física de semicondutores, tanto para aplicações³ como efeitos fundamentais⁴.

Estas heteroestruturas podem induzir desde uma superperiodicidade no cristal, através do crescimento alternado de camadas cristalinas de espessura de algumas dezenas de Angstroms de dois semicondutores diferentes (A e B) até o crescimento de uma camada única de um semicondutor (A) embebida em camadas muito grandes (semi-infinitas, na modelação teórica) de um outro semicondutor. No primeiro caso, os efeitos principais são a forte anisotropia introduzida no cristal com a redução da zona de Brillouin na direção de crescimento. No segundo caso, os estados eletrônicos adquirem um caráter quasi-bidimensional, com o estado eletrônico ao longo da direção de crescimento sendo determinado pelo confinamento criado nas interfaces da heteroestrutura. Na aproximação da função envelope, podemos visualizar este efeito como um poço de potencial para os estados de condução e de valência. Quando este poço quântico confina elétrons (na banda de condução) e buracos (na banda de valência) no mesmo material, dizemos que a heteroestrutura é do tipo-I. Nestes casos, a interação coulombiana é reforçada e

estados de impureza⁵ e excitons⁶ são bastante estáveis.

É este caso que vamos estudar nesta tese. O material protótipo é um poço quântico de $GaAs/(Ga, Al)As$. A alta qualidade no crescimento deste tipo de amostra e a possibilidade de descrever, com grande precisão, as propriedades eletrônicas na aproximação da função envelope^{7,8}, faz com que este sistema sirva de protótipo para estudar os efeitos da dimensionalidade na interação coulombiana. Tendo isto em mente, vamos estudar a evolução dos estados tipo-hidrogenóide a medida que o potencial do poço quântico começa a afetar os estados eletrônicos de forma determinante.

Consideramos o sistema na presença de um campo magnético forte. Este reforça a interação coulombiana e acrescenta um eixo preferencial que pode ou não coincidir com a direção de crescimento do poço quântico.

Vamos considerar dois casos extremos:

i) Quando a massa do buraco for finita. Neste caso, temos um exciton, estado fundamental da excitação óptica. Vamos nos concentrar no estudo dos estados fundamentais quando o campo magnético estiver aplicado perpendicularmente à direção de crescimento (Fig 1.1). Neste caso, o estado excitônico depende da competição entre três potenciais: o potencial de barreira, a interação coulombiana e os efeitos magnéticos.

ii) No outro extremo, consideramos o caso do centro de carga positiva fixo, ou seja, uma impureza doadora. Neste caso, vamos estudar os estados ligados altamente excitados, onde a estatística de níveis desempenha um papel fundamental.

Exciton é um par elétron-buraco ligado pela interação coulombiana atrativa, de uma forma similar como um elétron se liga a um próton para formar um átomo de hidrogênio. Ele é o estado excitado de mais baixa energia de semicondutores. Um exciton pode se mover pelo cristal e transportar energia; ele não transporta carga pois é eletricamente neutro. Quando

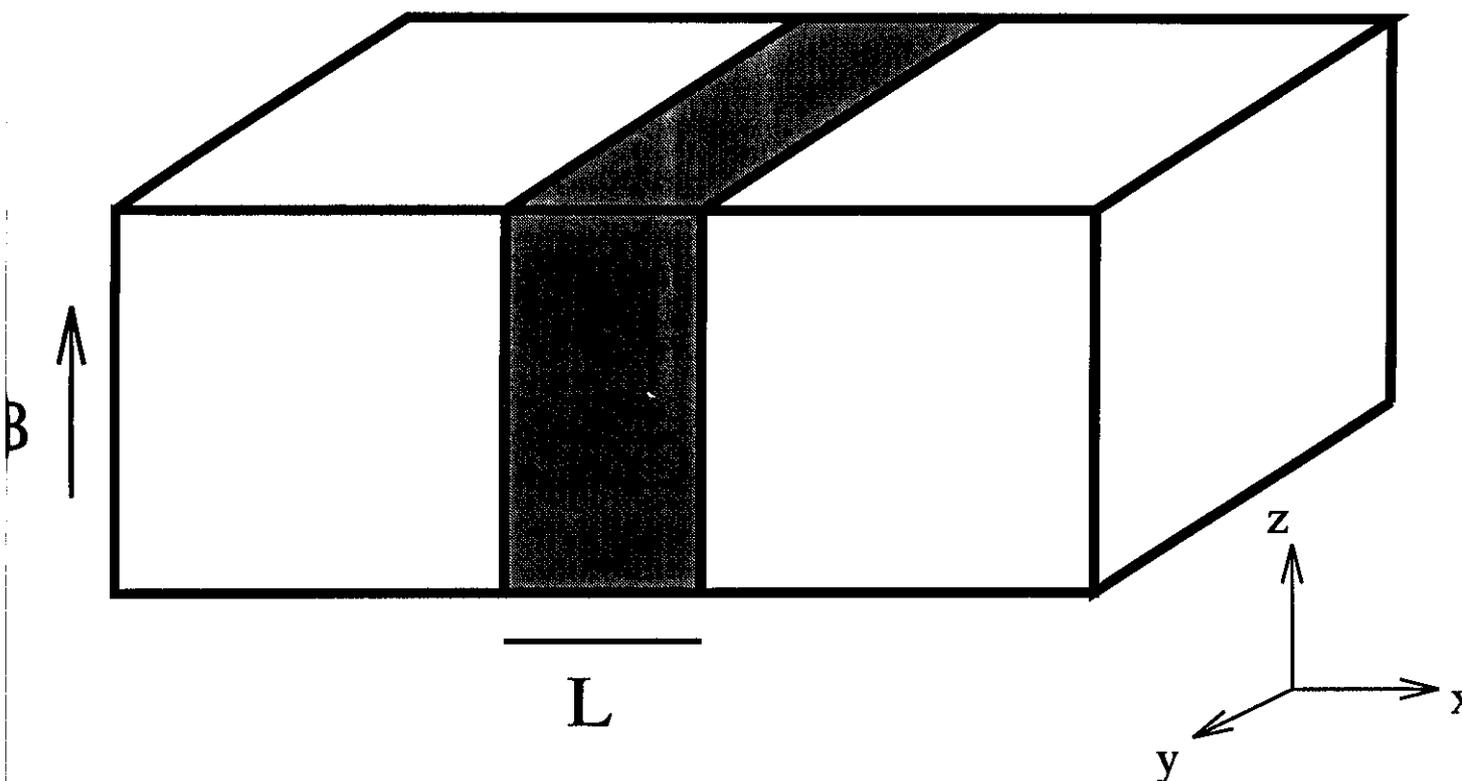


Figura 1.1: Representação esquemática do poço quântico em um campo magnético *no-plano*.

este par é ligado fracamente, com a distância média entre elétron e buraco grande em comparação com o parâmetro da rede, este é chamado exciton de Mott-Wannier.

Muitos estudos tratam excitons em poços quânticos (PQ) submetidos a um campo magnético perpendicular ao plano do PQ. Greene e Bajaj⁹ estudaram o caso do PQ de barreiras infinitas. Para PQ finitos, a Fig. 1.2 mostra os resultados de Yang e Sham¹⁰ para excitons em PQ sob fortes campos magnéticos ($> 6T$) e os resultados do trabalho para campos magnéticos fracos e intermediários ($< 10T$) de Bauer e Ando^{11,12} são apresentados na Fig. 1.3. Outros trabalhos teóricos foram realizados¹³ considerando a absorção

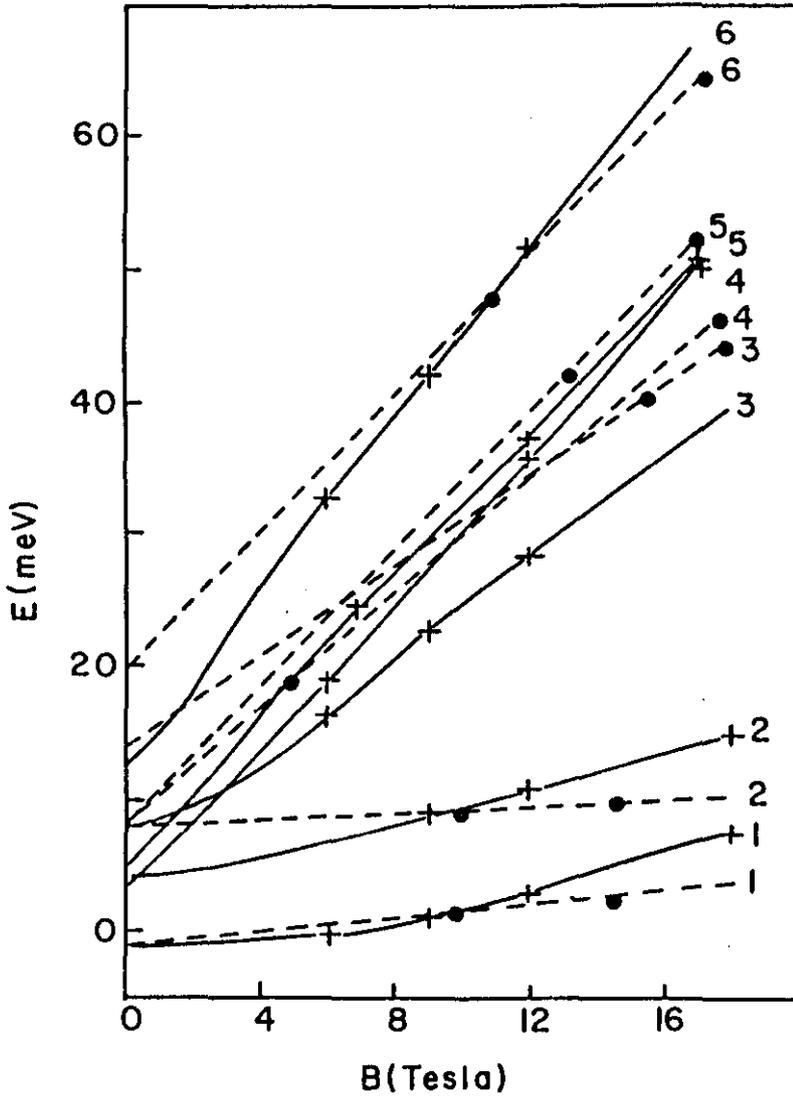


Figura 1.2: Energia em função do campo magnético perpendicular à direção do plano do poço. Resultados de Yang e Sham (Ref. 10).

intrabanda¹⁴ e estados s em campo magnéticos de intensidade arbitrária.¹⁵ Experimentos de alta resolução mediram o espectro magnético óptico e a comparação com cálculos permitiram identificar o estado fundamental e estados excitados dos excitons^{16–19}, em PQ sob pequena tensão²⁰, em sistemas de duas dimensões (2D)²¹, com localização das funções de onda²², na transição do regime 2D para 3D do exciton²³ e em campos magnéticos inclinados.²⁴

Para o caso de campo magnético aplicado paralelo ao plano do PQ (*no-plano*), poucos trabalhos trataram este problema. Nesta configuração, o movimento ciclotrônico é acoplado com o confinamento da barreira e os níveis de energia resultantes dependem dos efeitos combinados destes dois potenciais. Trabalhos teóricos onde a energia de ligação excitônica **não** é incluída foram realizados^{25–28}. Alguns espectros magnéticos experimentais podem ser vistos para poços quânticos em CdTe/Cd_{0.74}Mn_{0.26}Te²⁹ e GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs^{30–32}. Superredes sob campo magnético *no-plano* também foram objetos de estudos teóricos.^{33,34}

Na segunda parte da tese será estudado numericamente a manifestação de caos no espectro dos níveis de energia de uma impureza hidrogenóide tridimensional em um poço quântico parabólico na presença de um campo magnético *no-plano*. O comportamento caótico origina-se na destruição da simetria rotacional pelo potencial de confinamento e pelo campo magnético.

Uma impureza hidrogenóide submetida a um confinamento apresenta-se como uma possibilidade experimental interessante no estudo de caos em sistemas quânticos. Hawrylak e Grabowski⁵⁰ estudaram teoricamente as propriedades do espectro de energia para uma impureza hidrogenóide em um fio quântico em duas dimensões. Eles observaram para este sistema a transição de uma dinâmica regular a uma dinâmica caótica dependente do confinamento e da intensidade do campo.

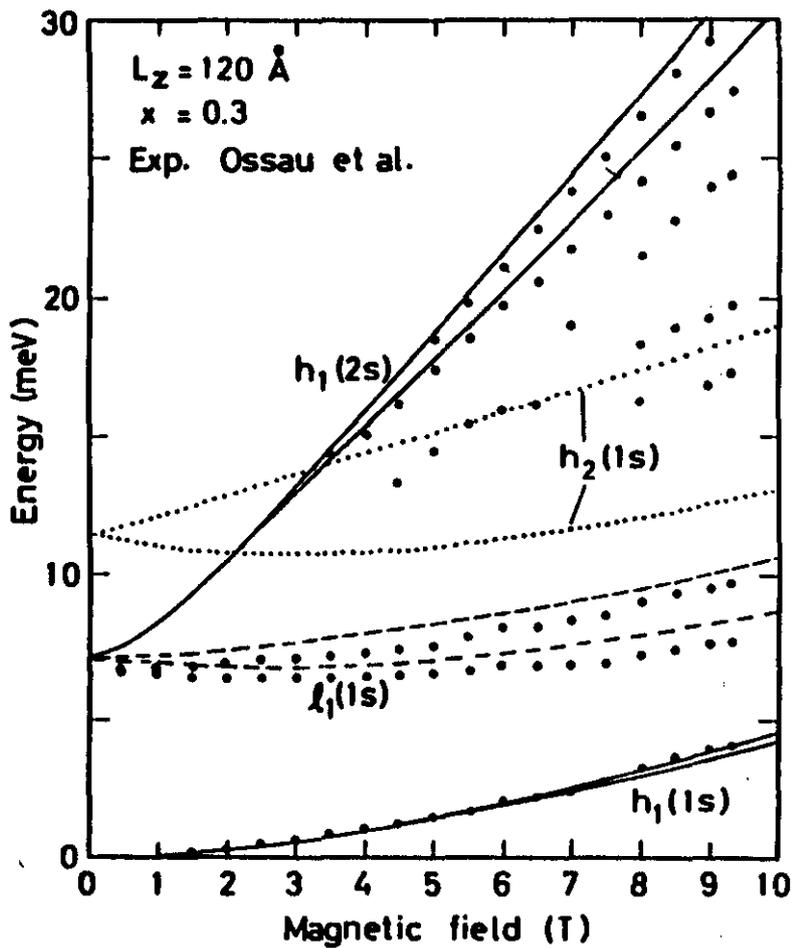


Figura 1.3: Energia em função do campo magnético perpendicular à direção do plano do poço. Resultados de Bauer e Ando (Ref. 11).

1.1 Teoria básica

A figura 1.4 mostra o raio efetivo de um par elétron-buraco ligados pela interação coulombiana existente entre estas duas partículas.

Este sistema, quando não submetido a potenciais externos, é isotrópico nas direções x , y e z , e tem uma simetria circular. Quando um potencial confinante unidimensional é aplicado ao sistema formado pelo par elétron-buraco ligado, ele se deforma nas três direções x , y , e z , como é mostrado na figura 1.5. A deformação na direção do confinamento é maior, como era esperado, mas também as demais direções se deformam com uma diminuição do raio efetivo em todas as direções, pois a energia de ligação aumenta devido ao efeito do potencial confinante.

Se um campo magnético é aplicado na direção paralela ao confinamento (Fig. 1.6), o raio efetivo do par também diminui nas três direções e se verifica uma tendência a seguir uma simetria cilíndrica na direção do campo. Estes exemplos indicam as dificuldades relacionadas com o problema de um campo magnético paralelo às interfaces de um poço quântico: quebra de simetrias e competição entre diferentes efeitos.

A seguir, é apresentado os resultados básicos das soluções do problema quando tratamos cada um dos potenciais presentes separadamente.

1.1.1 Poço quântico de potencial

Poço quadrado

Uma partícula dentro do poço de potencial de largura a da Fig. 1.7 terá sua dinâmica descrita pelo hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + V_0 Y \left(x^2 - a^2/4 \right)$$

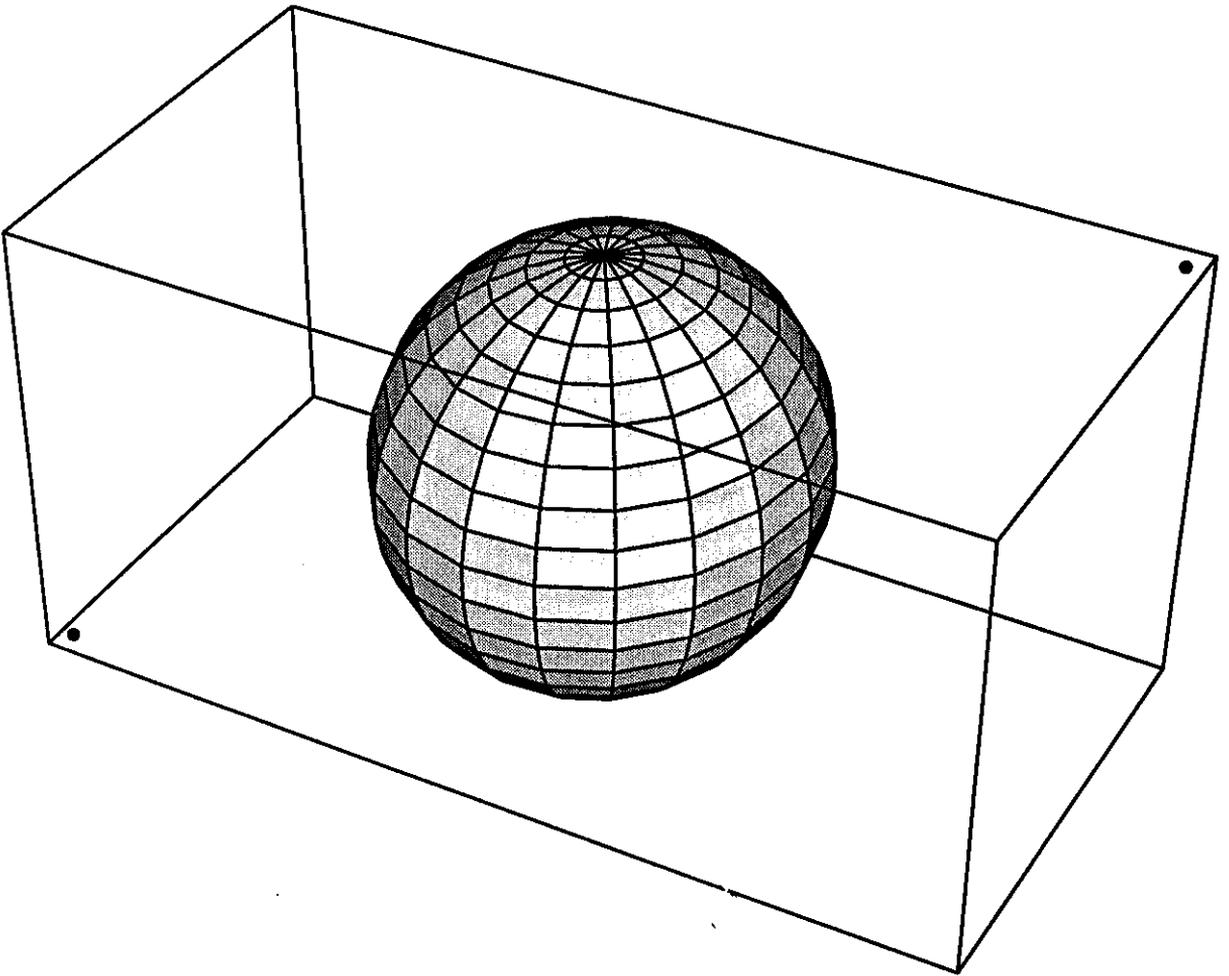


Figura 1.4: Raio efetivo do par elétron-buraco ligado pela interação coulombiana.

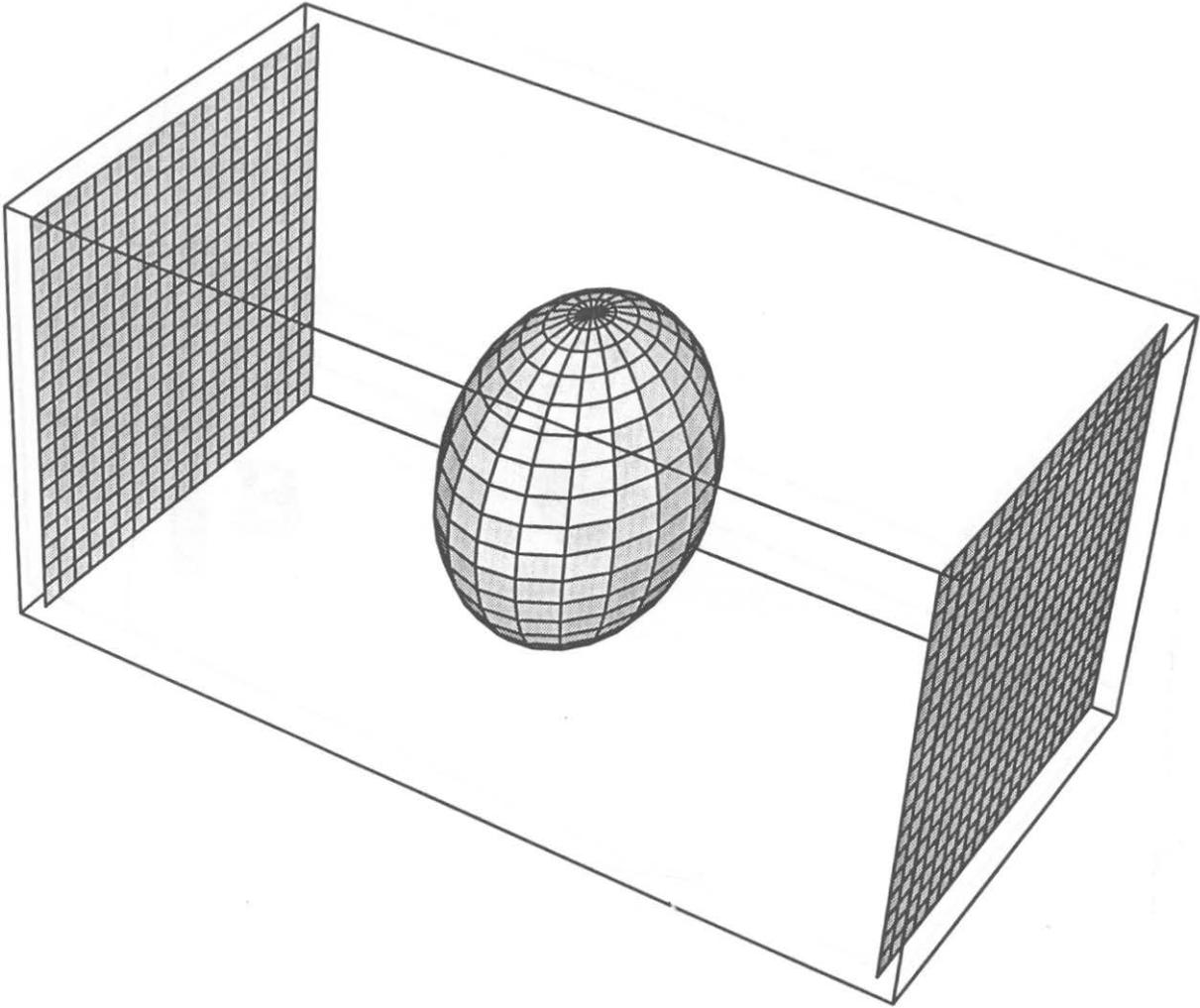


Figura 1.5: Raio efetivo do par elétron-buraco ligado sujeito a um confinamento unidimensional (planos).

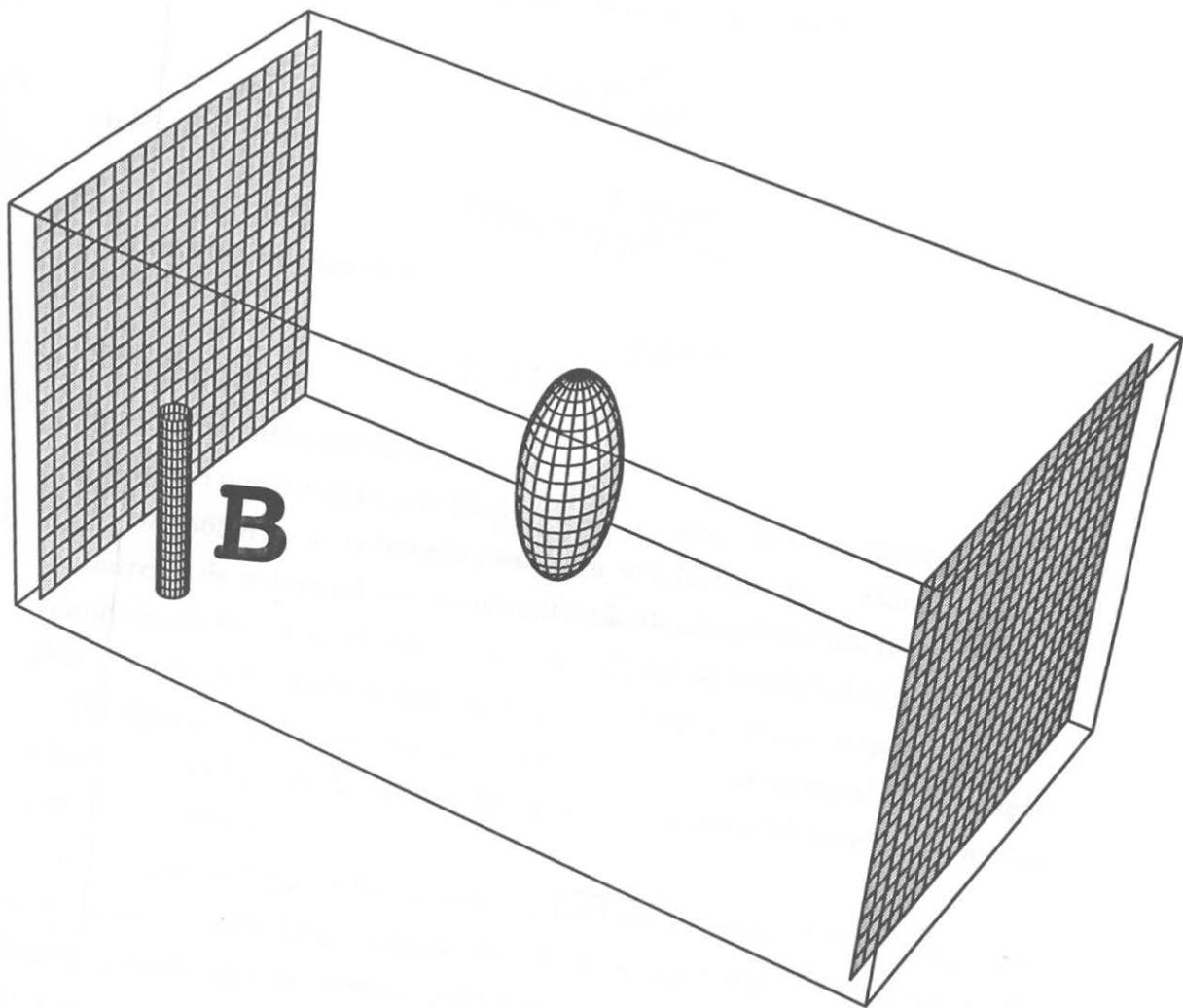


Figura 1.6: Raio efetivo do par elétron-buraco ligado sujeito a um confinamento unidimensional e a um campo magnético *no-plano*.

onde $Y(x)$ é a função degrau (1 para $x > 0$ and 0 para $x < 0$), m é a massa da partícula e \mathbf{P} seu momento linear.

Os autovalores do hamiltoniano H podem ser escritos como

$$E = \xi^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2}$$

onde

$$\xi \tan \xi = \sqrt{\frac{mV_o a^2}{2\hbar^2 - \xi^2}}$$

para estados simétricos e

$$-\xi \cot \xi = \sqrt{\frac{mV_o a^2}{2\hbar^2 - \xi^2}}$$

para estados anti-simétricos.

Para um poço quântico de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ a massa reduzida do elétron é $m = 0,0665m_o$ e a do buraco pesado $m = 0,34m_o$ e $V_o = 230meV$ (altura da barreira de potencial com a concentração de alumínio $x=0,3$; uma discontinuidade de banda de condução de $0,6 \Delta E_g$ foi utilizada) obtém-se a curva (Fig 1.8) da energia dos níveis em função da largura do poço quântico.

Na figura 1.9 é mostrada a energia do nível fundamental com relação a barreira em função da altura da barreira de potencial para um poço de largura $a = 20nm$.

A energia de ligação do exciton no GaAs é 4,8 meV. Vemos que, para $x=0,3$ e poços com largura acima de 40 nm a separação entre os níveis de buraco pesado são da mesma ordem que a energia de ligação do exciton. O mesmo ocorre para $L=20nm$ e concentração de alumínio menor que 1%. Nesta situação, a interação coulombiana acopla significativamente os níveis do poço. Uma descrição tridimensional para o exciton torna-se uma alternativa interessante.

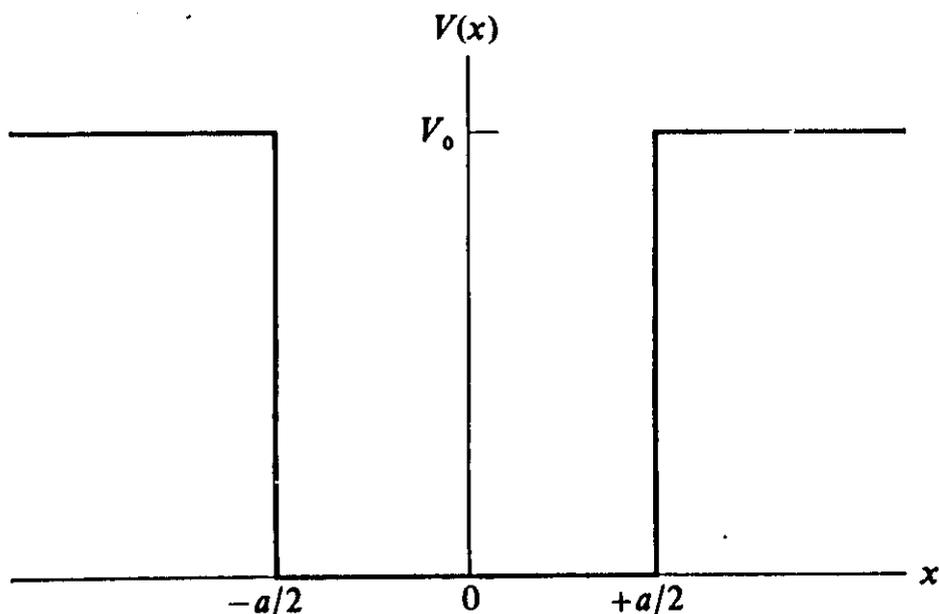


Figura 1.7: Um poço de potencial quadrado.

Poço parabólico (oscilador harmônico)

Para simplificar os cálculos, muitas vezes aproximamos o poço quadrado por um oscilador harmônico. Este pode ser visto como o primeiro termo de uma expansão de Fourier do potencial (exceto por uma constante).

O hamiltoniano de uma partícula dentro do poço de potencial parabólico da figura 1.10 é escrito como

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + \frac{k}{2} x^2$$

onde k é uma constante.

Os níveis de energia são dados por

$$E_n = (n + 1/2) \hbar \sqrt{k/m}$$

onde n é um número inteiro positivo ou zero.

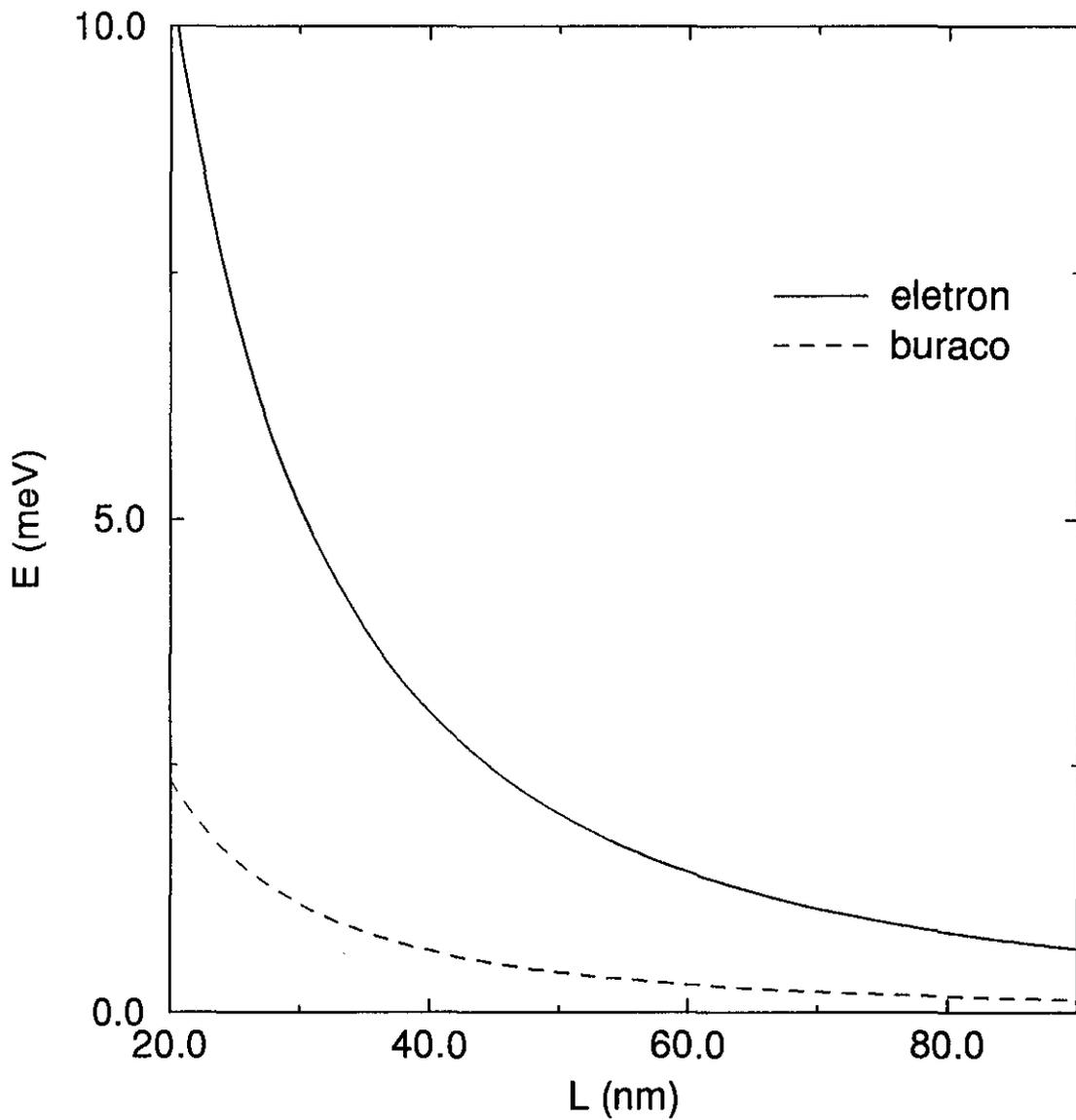


Figura 1.8: Dependência da energia em função da largura do poço quântico para uma heterojunção $GaAl/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$.

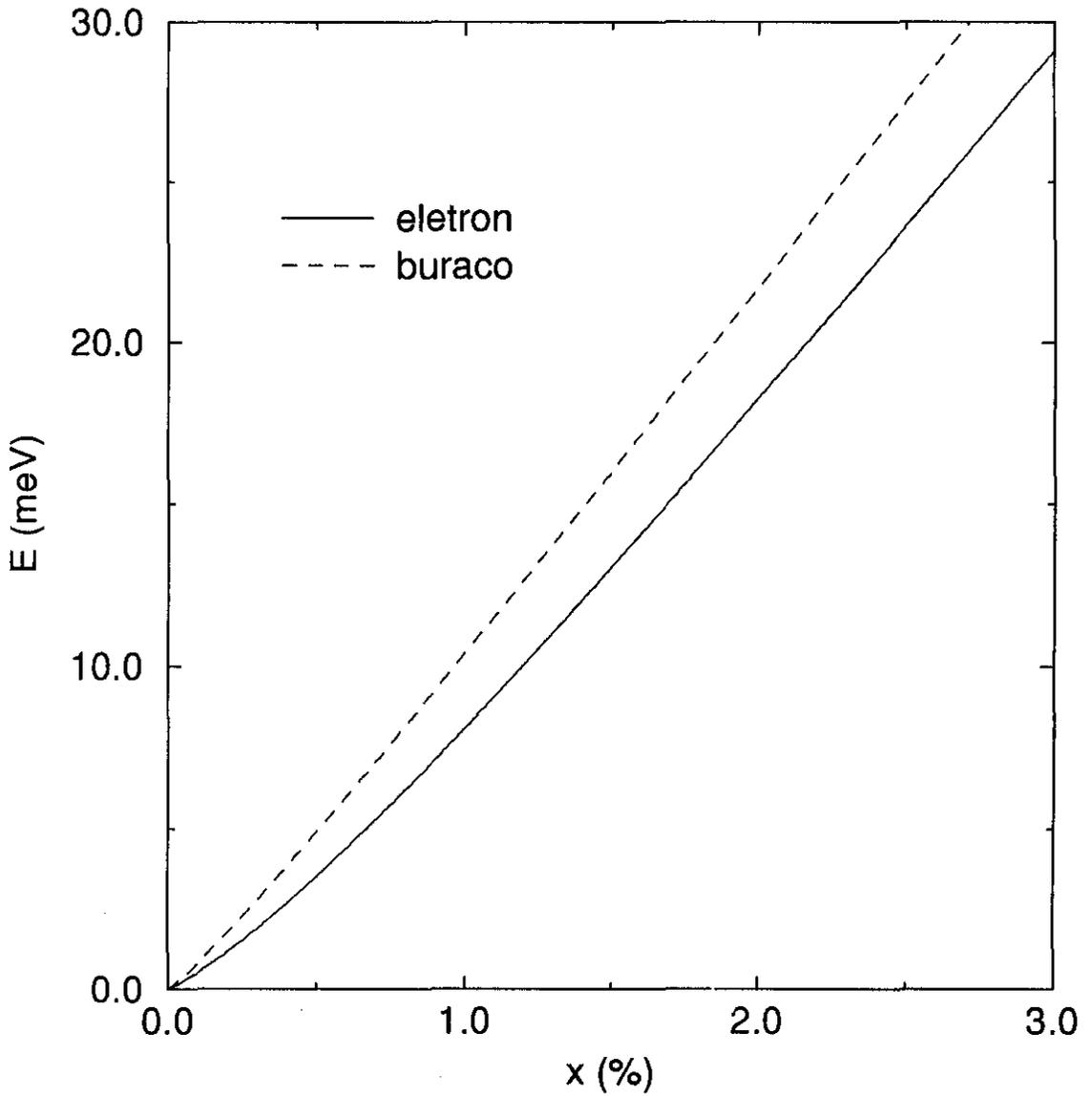


Figura 1.9: Dependência da energia do estado fundamental em função da concentração de alumínio para um poço quântico de largura $a = 20nm$.

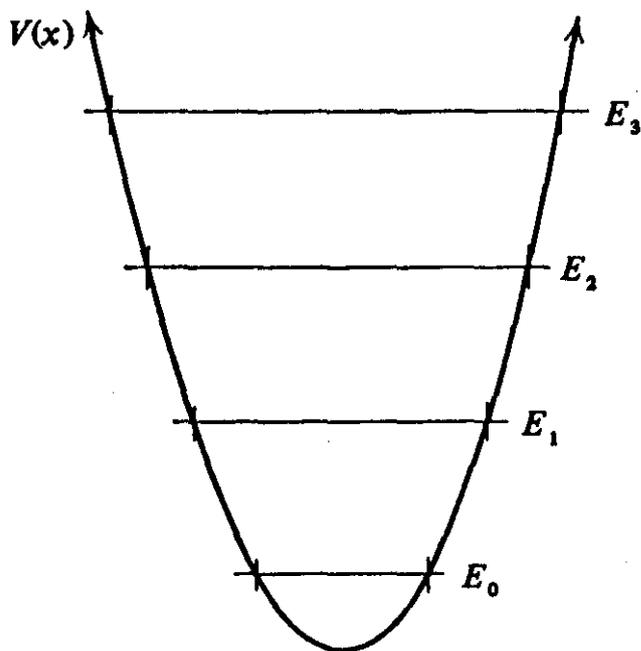


Figura 1.10: O potencial do oscilador harmônico simples com alguns dos primeiros autovalores.

1.1.2 Campo magnético

Considerando uma partícula de carga q em um campo magnético \mathbf{B} , teremos o operador hamiltoniano da forma

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} - \frac{q\mathbf{A}}{c} \right)^2$$

onde \mathbf{A} é o vetor potencial magnético. Tomando-se um campo magnético uniforme na direção z , os autovalores do hamiltoniano H podem ser escritos como

$$E(n, v_z) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

onde a frequência ciclotrônica é dada por

$$\omega_c = \frac{|q|B}{mc}$$

Cada n representa um nível de energia, os chamados *níveis de Landau*.

1.1.3 Interação coulombiana

Tomando-se uma partícula carregada submetida a um potencial coulombiano atrativo, pode-se escrever o operador hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 - \frac{q^2}{\epsilon r}$$

onde r é a distância da partícula ao centro atrativo. Os autovalores do hamiltoniano H são

$$E = -\frac{1}{n^2} E_I = -\frac{1}{(k+l)^2} \frac{mq^4}{2\hbar^2 \epsilon^2}$$

Para um par elétron-buraco ligado (exciton) em um semiconductor, por exemplo GaAs, o valor de E_I é 4,8 meV. Usando-se unidades atômicas $E_I = 1/2 \text{Hartree}$.

1.1.4 Interação coulombiana em campo magnético

Considerando uma partícula (sem *spin*) submetida simultaneamente a um potencial escalar central e um vetor potencial magnético, temos o hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} - \frac{q\mathbf{A}}{c} \right)^2 - \frac{q^2}{\epsilon r}$$

Utilizando um calibre simétrico

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}$$

pode-se então reescrever o hamiltoniano H na forma

$$H = H_0 + H_1 + H_2$$

onde

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \frac{q^2}{r}$$

$$H_1 = -\frac{q}{2m} (\mathbf{r} \times \mathbf{P}) \cdot \mathbf{B}$$

$$H_2 = \frac{q^2 \mathbf{B}^2}{8m} r_{\perp}^2$$

O termo H_1 é chamado de paramagnético e H_2 é o termo diamagnético.

Este problema não possui solução analítica e deve ser resolvido numericamente. Em materiais semicondutores H_2 domina H_1 para campos típicos usados em laboratório.

Capítulo 2

Quantização do centro-de-massa de exciton em poço quântico sujeito a campo magnético perpendicular à direção de crescimento

A quantização do CM é usada para calcular estados excitônicos na presença de um campo magnético aplicado paralelo ao plano do PQ. A penetração da função de onda na barreira e sua deformação devido ao poço é levada em consideração através do acoplamento entre o movimento relativo e do CM. É estudado os estados dos excitons enfatizando a mistura do movimento relativo e do movimento do CM para várias larguras do poço e intensidades do campo magnético, desde um poço raso até poços profundos. Isto permite visualizar as mudanças na dimensionalidade do sistema. Os resultados apresentam boa concordância com os resultados experimentais disponíveis.

2.1 Introdução

Nesta parte da tese é usado o método variacional para estudar o exciton em um PQ submetido a um campo magnético paralelo à interface. A solução é limitada pela capacidade da função de onda do exciton, derivada para o *bulk*, se distorcer na geometria do PQ. Em poços largos a quantização do exciton é determinada, pelo movimento do CM^{35,36}, e não pela descrição usual da quantização do elétron e do buraco separados⁸. Em poços profundos ou estreitos a quebra da invariância translacional invalida a não correlação entre o movimento relativo e do CM (limite 3D) e eventualmente leva ao comportamento 2D do exciton^{9,8}. Um regime intermediário interessante para a dimensionalidade aparece em PQ de barreiras rasas, quando o potencial de interação Coulombiano e de confinamento são da mesma ordem.^{37,38}

Aqui é apresentado os resultados do cálculo para estados do exciton nestas situações para o sistema GaAs-(Ga,Al)As. A quantização do CM do exciton 3D é usada para descrever os efeitos da barreira de potencial do PQ. Quando a largura do PQ diminui ou sua altura aumenta, a quebra na invariância translacional leva ao exciton tipo 2D. Neste caso, a função de onda do exciton sofre uma deformação e o movimento relativo se mistura com o movimento do CM. O campo magnético induz um acoplamento extra entre o movimento relativo e do CM. É importante observar que este não é o caso quando o campo magnético está na direção de crescimento.

Esta parte da tese é organizada da seguinte forma: a teoria de exciton magnético em uma aproximação de CM com o potencial de PQ é apresentada na seção 2.2. Na seção 2.3 são apresentados os resultados para o cálculo variacional da energia, raio e densidade de probabilidade do exciton em função do campo magnético e da largura e profundidade do poço. Também a transição 3D-2D para poços quânticos profundos e rasos é discutida na subseção 2.3.1.

As conclusões são apresentadas na seção 2.4.

2.2 Teoria

Considerando a aproximação parabólica para as subbandas do PQ tem-se as bandas de valência desacopladas. Desta forma as subbandas de buraco são descritas pelo termo diagonal do Hamiltoniano de Luttinger³⁹, onde a massa efetiva do buraco m é dada por $m_{\parallel} = \frac{m_o}{(\gamma_1 \mp 2\gamma_2)}$ para a direção z e $m_{\perp} = \frac{m_o}{(\gamma_1 \pm \gamma_2)}$ para as direções x e y para o buraco pesado (sinal superior) e o buraco leve (sinal inferior), γ_1 e γ_2 são os parâmetros de Luttinger e m_o é a massa de repouso do elétron.

É escolhido uma massa anisotrópica, com simetria axial, ao longo da direção do campo magnético. Esta escolha aplica-se melhor em situação de forte campo magnético e PQ largos. Nos limites de fracos campos e forte confinamentos, nossos resultados serão apenas qualitativos devido a não inclusão dos termos fora da diagonal do Hamiltoniano de Luttinger.

Escolhendo um calibre simétrico para o vetor potencial magnético $\mathbf{A}_{e(h)} = -\frac{1}{2}\mathbf{r}_{e(h)} \times \mathbf{B}$, pode-se escrever o Hamiltoniano do exciton na aproximação elétron-buraco, com o potencial de confinamento do poço quadrado e finito da seguinte forma

$$H = E_g + T_e(\mathbf{r}_e) + V_e Y(x_e^2 - L^2/4) + T_h(\mathbf{r}_h) + V_h Y(x_h^2 - L^2/4) + V_{e-h}$$

onde

$$T_e(\mathbf{r}_e) = \frac{1}{2m_e}(-i\hbar\nabla_e + \frac{e}{c}\mathbf{A}_e)^2$$

$$T_h(\mathbf{r}_h) = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla_h - \frac{e}{c}\mathbf{A}_h)^2$$

$$V_{e-h} = -\frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}$$

$Y(x)$ é a função degrau (1 para $x > 0$ and 0 para $x < 0$), ϵ é a constante dielétrica estática e $V_{e(h)}$ é o potencial da barreira do elétron (buraco), dado por 0.6 (0.4) ΔE_g onde ΔE_g é a discontinuidade do *gap* nas interfaces.

É usada a transformação de CM

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h \\ \mathbf{R} &= \alpha_1 \rho_e + \beta_1 \rho_h + \alpha_2 \mathbf{z}_e + \beta_2 \mathbf{z}_h \end{aligned}$$

No que se segue, usamos coordenadas em letras maiúsculas para designar o CM e em letras minúsculas o movimento relativo, onde $\rho_{e(h)} = x_{e(h)}\mathbf{i} + y_{e(h)}\mathbf{j}$. As constantes α_i e β_i são arbitrárias com a única condição de que $\alpha_i + \beta_i \neq 0$ para que a transformação seja bem definida. Nos cálculos foi imposto $\alpha_i + \beta_i = 1$ de forma que o jacobiano da transformação seja igual a 1. Mantendo esta condição, α_i and β_i podem ser escolhidos para simplificar o Hamiltoniano. A escolha usual é $\alpha_{1(2)} = m_e/M_{\perp(\parallel)}$ e $\beta_{1(2)} = m_{\perp(\parallel)}/M_{\perp(\parallel)}$ com a massa total M dada por $M_{\perp(\parallel)} = m_e + m_{\perp(\parallel)}$. Definindo a massa reduzida μ como $\mu_{\perp(\parallel)}^{-1} = m_e^{-1} + m_{\perp(\parallel)}^{-1}$ o Hamiltoniano do exciton pode ser reescrito como

$$H = E_g + T_{\mathbf{R}}(\mathbf{R}) + (V_e + V_h)Y(X^2 - L^2/4) + T_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) + V_c(\mathbf{r}) + V_{mix}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

onde

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{R}}(\mathbf{R}) &= -\frac{\hbar}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \\ T_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) &= -\frac{\hbar}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{\mathbf{A}_{\mathbf{r}}^2}{2\mu} - \frac{ie}{\hbar c} \left(\frac{1}{m_e} - \frac{1}{m_{\perp}}\right) \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{r}} \end{aligned}$$

$$V_c = -\frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}|}$$

e $V_{mix}(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ é o potencial de mistura entre o movimento relativo e do CM.

Considerando poços largos ou campo magnéticos fortes, a escolha da transformação de CM é bastante apropriada. Tomando \mathbf{B} na direção z , pode-se reescrever o Hamiltoniano da seguinte forma

$$H = E_g + T_{\rho\phi} + T_z + H_\rho + H_\phi + V_c + T_R + V_X + V_{Xx} + V_{Xy}$$

onde

$$T_{\rho\phi} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_\perp} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

$$T_z = -\frac{\hbar^2}{2\mu_\parallel} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$H_\rho = \frac{e^2 B^2}{8c^2 \mu_\perp} \rho^2$$

$$H_\phi = -\frac{ie\hbar B}{2c} \left(\frac{1}{m_e} - \frac{1}{m_\perp} \right) \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$V_c = -\frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + z^2}}$$

$$T_{\mathbf{R}} = -\frac{\hbar^2}{2M_\perp} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2M_\parallel} \frac{\partial^2}{\partial Z^2}$$

$$V_X = (V_e + V_h) Y(X^2 - L^2/4)$$

$$V_{Xx} = V_e \left[Y\left(X + \frac{L}{2}\right) - Y\left(X + x \frac{m_\perp}{M_\perp} + \frac{L}{2}\right) + Y\left(X + x \frac{m_\perp}{M_\perp} - \frac{L}{2}\right) - Y\left(X - \frac{L}{2}\right) \right] + \\ + V_h \left[Y\left(X + \frac{L}{2}\right) - Y\left(X - x \frac{m_e}{M_\perp} + \frac{L}{2}\right) + Y\left(X - x \frac{m_e}{M_\perp} - \frac{L}{2}\right) - Y\left(X - \frac{L}{2}\right) \right]$$

$$V_{Xy} = \frac{eBy}{c} \frac{i\hbar}{M_\perp} \frac{\partial}{\partial X}$$

O procedimento geral para se resolver o problema é projetar o Hamiltoniano total em uma base apropriada. Escolhendo uma base separável no movimento reduzido \mathbf{r} e no movimento do centro de massa \mathbf{R}

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{n,m,l} C_{nml} \chi_n(z) g_m(\rho, \phi) F_l(\mathbf{R})$$

Seguindo o trabalho de Altarelli and Lipari⁴⁰, usamos uma base gaussiana, com a simetria do campo magnético,

$$\chi_n(z) = N_n z^n e^{-\alpha_i^2 z^2}$$

$$g_m(\rho, \phi) = M_m e^{\pm im\phi} \rho^m e^{-\gamma_j^2 \rho^2/4}$$

onde N_n e M_m são contantes de normalização e α_i e γ_j são parâmetros escolhidos dentro de limites físicos e C_{nml} são os parâmetros variacionais.

Para a função de onda do CM pode-se tomar uma função do tipo de poço para a direção X e uma função de onda de partícula livre para as direções Y e Z

$$F_l(\mathbf{R}) = \frac{e^{i(K_Y \cdot Y + K_Z \cdot Z)}}{\sqrt{S}} \cdot f_l(X)$$

S é a area da amostra. Para $-L/2 < |x| < L/2$

$$f_l(X) = \begin{cases} A_l \cos(k_l X) & \text{para } l \text{ ímpar (estados simétricos)} \\ A_l \sin(k_l X) & \text{para } l \text{ par (estados assimétricos)} \end{cases} \quad e$$

$$f_l(X) = \begin{cases} B_l e^{\rho_l(X+L/2)} & \text{para } x < -L/2 \\ (-1)^{l+1} B_l e^{-\rho_l(X-L/2)} & \text{para } x > L/2 \end{cases}$$

onde A_l e B_l são contantes de normalização.

Os estados excitônicos são calculados pela minimização do Hamiltoniano em função dos parâmetros variacionais. O problema variacional é então substituído por um problema generalizado de autovalores

$$H\Psi = ES\Psi$$

onde S é a matriz de superposição. As soluções são obtidas por diagonalização numérica. O cálculo dos elementos de matriz são mostrados no apêndice A.

2.3 Resultados e discussões

Os parâmetros físicos utilizados nos cálculos correspondem ao do poço quântico $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ com $\epsilon = 12.5$, $m_e = 0.0665m_0$ e os parâmetros de Luttinger $\gamma_1 = 6,85$ e $\gamma_2 = 2,1$. Os α_i e γ_j são discretos e variam em progressão geométrica dentro do intervalo 1 nm-100 nm. É usado $n=0$ para z e $m=0,1,2$ para as funções de onda em ρ, ϕ . O tamanho da base é controlado até que se obtenha convergência. O *gap* é dado por $1155x + 370x^2$ [meV].

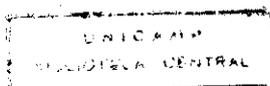
Na Fig. 2.1 é mostrado a energia do magneto-exciton

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle - E_{e1} - E_{hh1} - E_g$$

onde E_{e1} e E_{hh1} são a primeira subbanda de energia no PQ para elétron e buraco respectivamente, na ausência de campo magnético. Para comparação, é mostrado o valor da energia na ausência do poço. Para campo magnético nulo, a energia de ligação do exciton converge para a energia do valor sem confinamento. Assim uma dependência linear com o campo magnético pode ser vista para campos fortes (níveis de Landau).

Na Fig. 2.2 é mostrado o raio do exciton ao longo da direção do eixo x ($X = 0$)

$$R_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$$



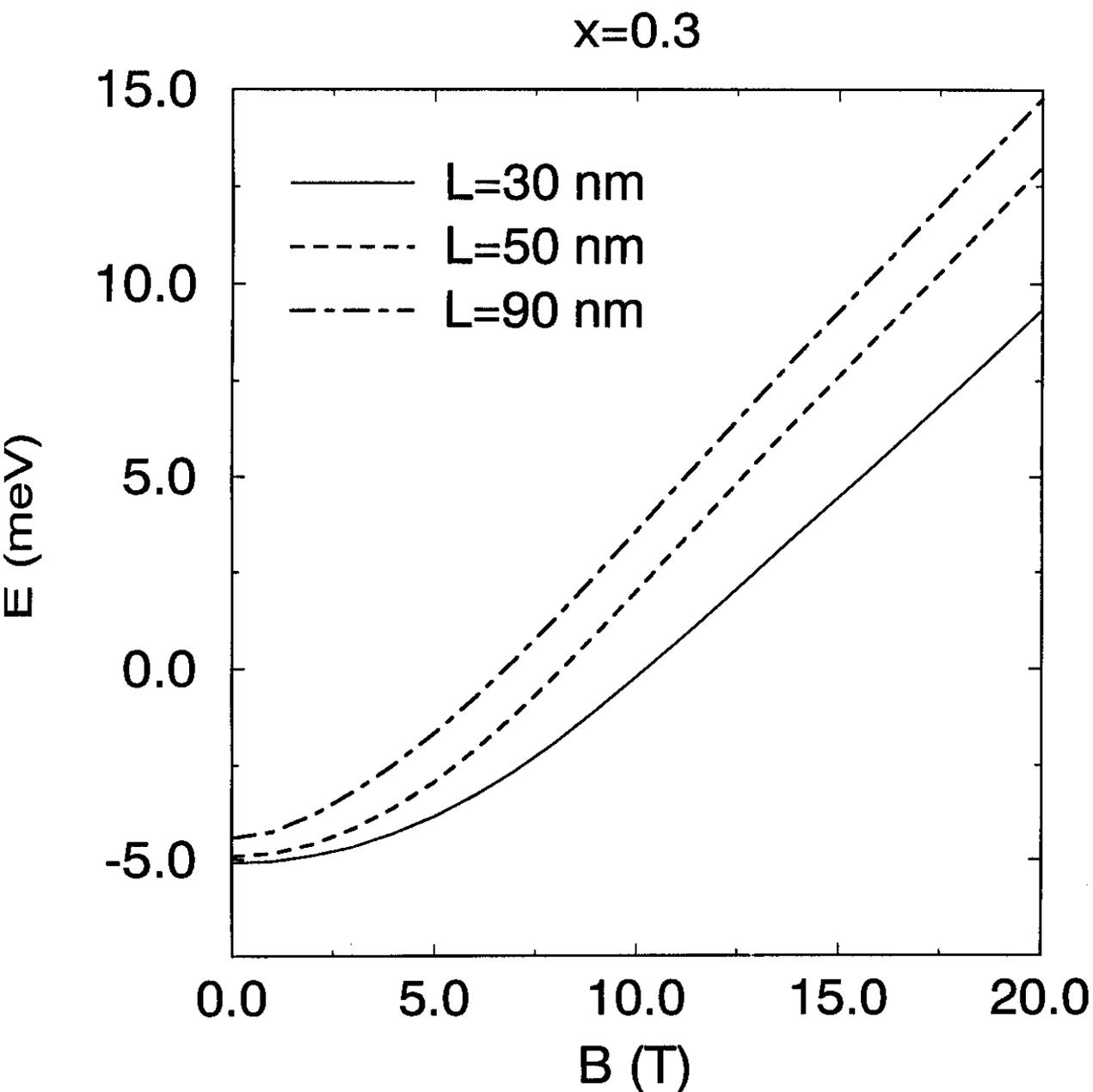


Figura 2.1: Dependência da energia do estado fundamental do exciton em função do campo magnético em um poço quântico de $GaAl/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$.

para um PQ de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ com largura L em função do campo magnético. O confinamento geométrico domina os níveis de energia para campos magnéticos pequenos, enquanto que o confinamento magnético domina para campos magnéticos fortes. Em detalhe, para campo magnético fraco a largura do PQ é a lei de escala que domina a quantização dos portadores, conseqüentemente a dependência do raio R_x com a largura do poço L pode ser vista para campos pequenos, com poços estreitos apresentando um raio excitônico menor. Isto é consequência do confinamento, o qual aumenta a energia de ligação para poços estreitos e conseqüentemente deforma o exciton. Com o aumento do campo magnético o confinamento magnético se torna mais importante, enquanto a extensão da função de onda diminui gradativamente. Finalmente para campos altos o comprimento magnético $l_c = \sqrt{\hbar/eB}$ é significativamente menor que a largura do PQ e o campo determina a quantização dos portadores.

O raio do exciton $R_{x_i} = \sqrt{\langle x_i^2 \rangle}$ para $x_i = x, y, z$ em função do campo magnético é plotado na Fig. 2.3, onde pode ser visto a competição entre o confinamento do PQ e o efeito do campo magnético. Para campo magnético pequeno, R_y e R_z são praticamente similares. Já R_x tem um valor menor como consequência do confinamento. Na medida em que no campo magnético aumenta, este domina sobre o efeito de confinamento da barreira. Conseqüentemente, R_y aproxima-se de R_x e estes apresentam valores menores. R_z também diminui, mas em uma taxa menor, tendo em vista que o campo magnético tem apenas efeitos indiretos ao longo desta direção. Para campo magnético forte uma isotropia é claramente ditada pelo campo magnético. A pequena diferença entre R_x e R_y são efeitos remanescentes da presença do confinamento do PQ. A dependência da densidade de probabilidade com a posição do CM é mostrada na Fig. 2.4, onde duas curvas para a componente x da densidade de probabilidade são plotadas, uma para o CM no centro do

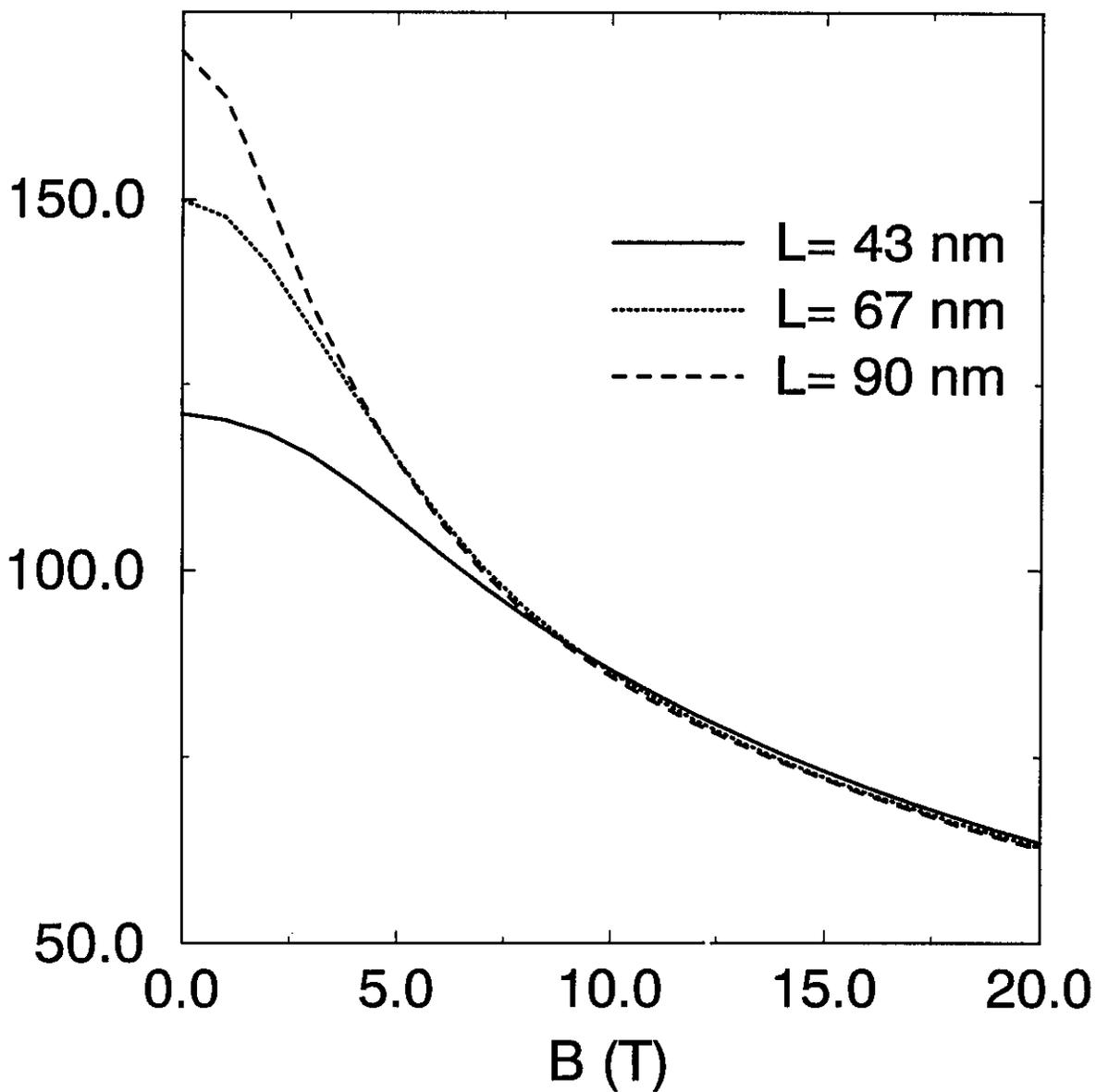
$x=0.3$ 

Figura 2.2: Raio excitônico efetivo na direção x em função do campo magnético para diferentes larguras do poço quântico.

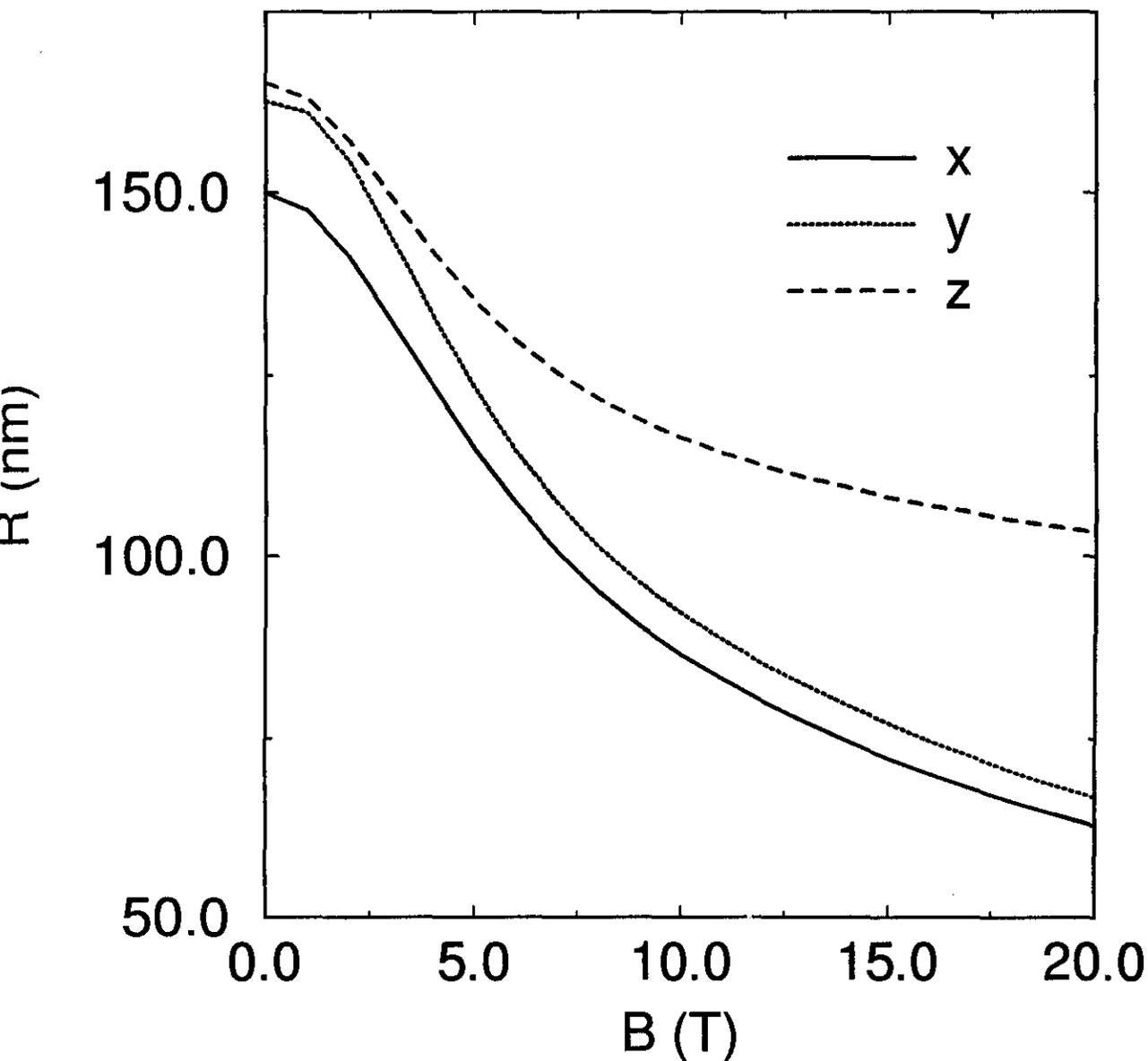
$L=67 \text{ nm}$, $x=0.3$ 

Figura 2.3: Raio excitônico para as direções x , y e z em função do campo magnético em um poço quântico de largura $L=67 \text{ nm}$ e concentração de alumínio de 30% ($x=0,3$).

poço ($X=0$) e outra para o CM na barreira ($X=L/2$). Note que para $X=L/2$ a densidade de probabilidade é distorcida e é muito menor que para $X=0$, como era esperado.

A figura 2.5 mostra o deslocamento de energia da transição da subbanda do buraco pesado para a subbanda do elétron em função do campo magnético *no-plano*, comparado com resultados experimentais³⁰. O comportamento do deslocamento de energia dos picos é bem reproduzido por nossos cálculos (linhas contínuas), tanto para o estado fundamental, como também para os dois primeiros estados excitados. Estes resultados mostram que as aproximações feitas em nossos cálculos são muito boas para o estudo proposto.

2.3.1 Transição 3D-2D do exciton magnético

Em PQ largos o elétron e o buraco são fortemente correlacionados em todas as direções, mas o problema de dois corpos do exciton, tomando em conta a interação Coulombiana, pode ser descrito em termos do movimento relativo e do CM não correlacionados. Para confinamentos fortes do PQ, a cinética dos portadores ao longo da direção de crescimento é determinada pelo potencial da barreira e uma descrição tipo 2D para os estados excitônicos é mais apropriada.

O efeito da barreira quebra a invariância translacional, que em nosso tratamento teórico é dada pelo potencial de mistura entre o movimento relativo e o movimento do CM, V_{mix} . Desta forma, comparando-se os resultados com e sem V_{mix} é possível identificar os mecanismos físicos que controlam a transição de um exciton do tipo 3D para um exciton do tipo 2D.

Na Fig. 2.6 é graficado a energia do exciton em função do campo magnético para $L=30, 50$ e 90 nm com e sem o potencial de mistura entre o movimento relativo e do CM. O campo magnético *no-plano* muda a natureza do movimento do exciton de um par elétron-buraco mais fracamente correlacionado

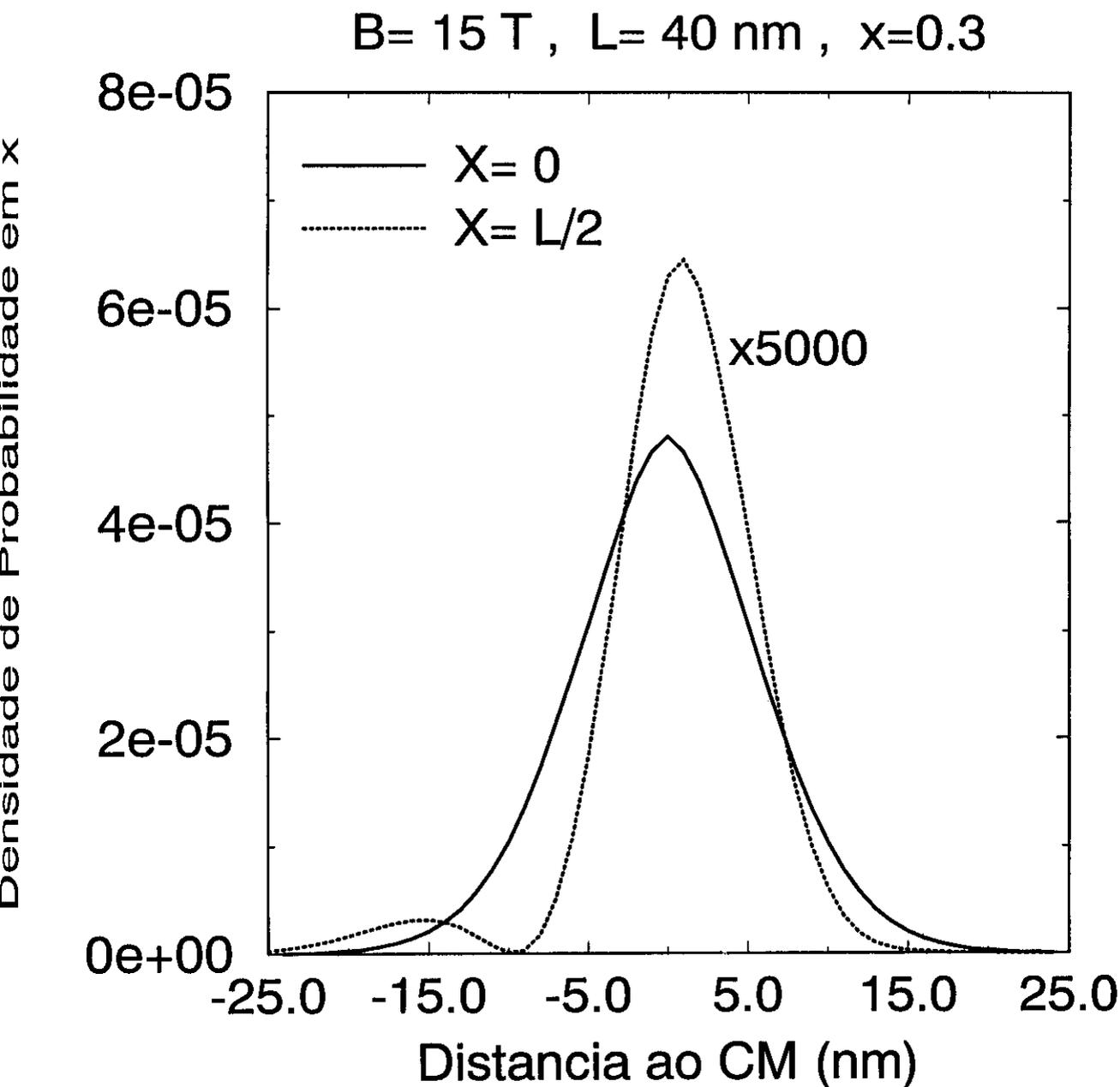


Figura 2.4: Densidade de probabilidade $\Psi^*\Psi$ em função da distância ao centro-de-massa para duas posições diferentes do CM: no centro do poço ($X=0$) e para o CM na posição da barreira ($X=L/2$).

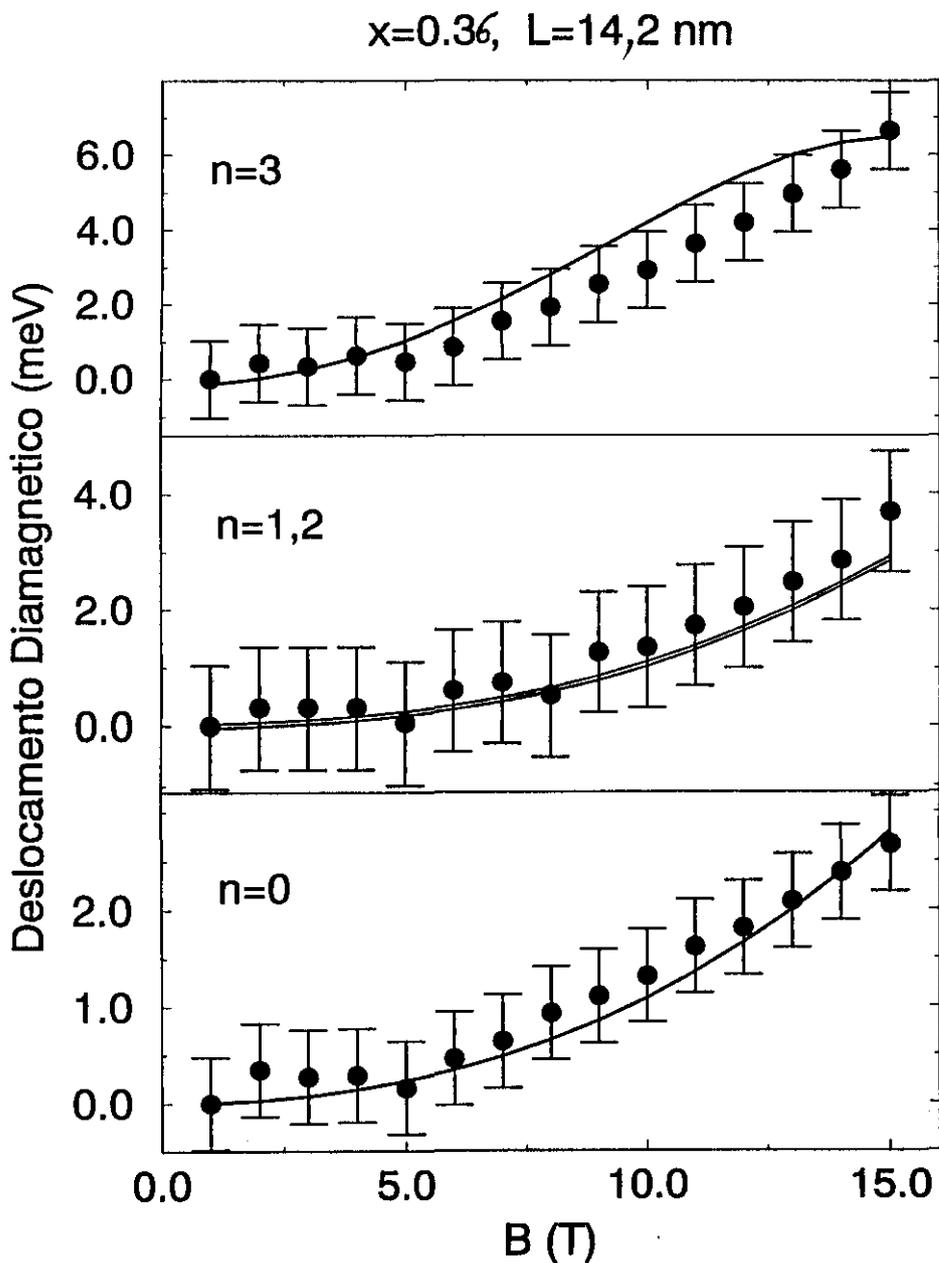


Figura 2.5: Deslocamento magnético de diferentes transições entre subbandas de buraco pesado e elétron para um poço quântico de largura $L=14,2$ nm. As linhas contínuas são resultados dos cálculos e os pontos são resultados experimentais da Ref. 30 para $GaAs/Al_{0.36}Ga_{0.64}As$.

para um par elétron-buraco fortemente correlacionado (limite 3D).

A dependência do comportamento 3D-2D é mostrada na Fig. 2.7, para um poço com 30% de alumínio na barreira, em função da largura do poço e da intensidade do campo magnético. É considerada para este gráfico que uma diferença maior que 0.5 meV entre as energias com e sem V_{mix} caracteriza um exciton do tipo 2D e quando a diferença é menor o exciton é do tipo 3D. Este valor é arbitrário (10% da energia de ligação do exciton 3D), mas serve para nos dar uma indicação do comportamento excitônico.

Poço quântico raso

Um novo regime de confinamento aparece quando a profundidade do PQ se torna menor que a energia de ligação coulombiana do exciton³⁷. PQ's rasos (pequena concentração de alumínio) são atualmente de considerável interesse do ponto de vista da física fundamental e para potenciais aplicações em dispositivos. O efeito do campo magnético em PQ extremamente raso foi objeto de estudos⁴¹ e o acoplamento entre as distribuições nas direções *no-plano* e de quantização foram discutidas.

A figura 2.8 mostra o mesmo que a Fig. 2.6, mas para $x=0.01$ (1%). Note que aqui a curva sem o potencial de mistura difere da curva com o potencial V_{mix} em duas regiões distintas, uma para campos fracos e outra para campos fortes. Na primeira região a diferença das duas curvas aparece devido ao potencial do poço induzir um comportamento do tipo 2D no exciton e na segunda região é o efeito do campo magnético *no-plano* no termo V_{Xy} do Hamiltoniano que induz uma diferença e quebra a correlação elétron-buraco. Um comportamento do tipo 3D pode ser visto para o exciton entre as duas regiões, onde os resultados da energia com e sem V_{mix} são coincidentes.

Uma dependência 3D-2D para PQ rasos em função da concentração de alumínio e da intensidade do campo magnético é apresentada na Fig. 2.9.

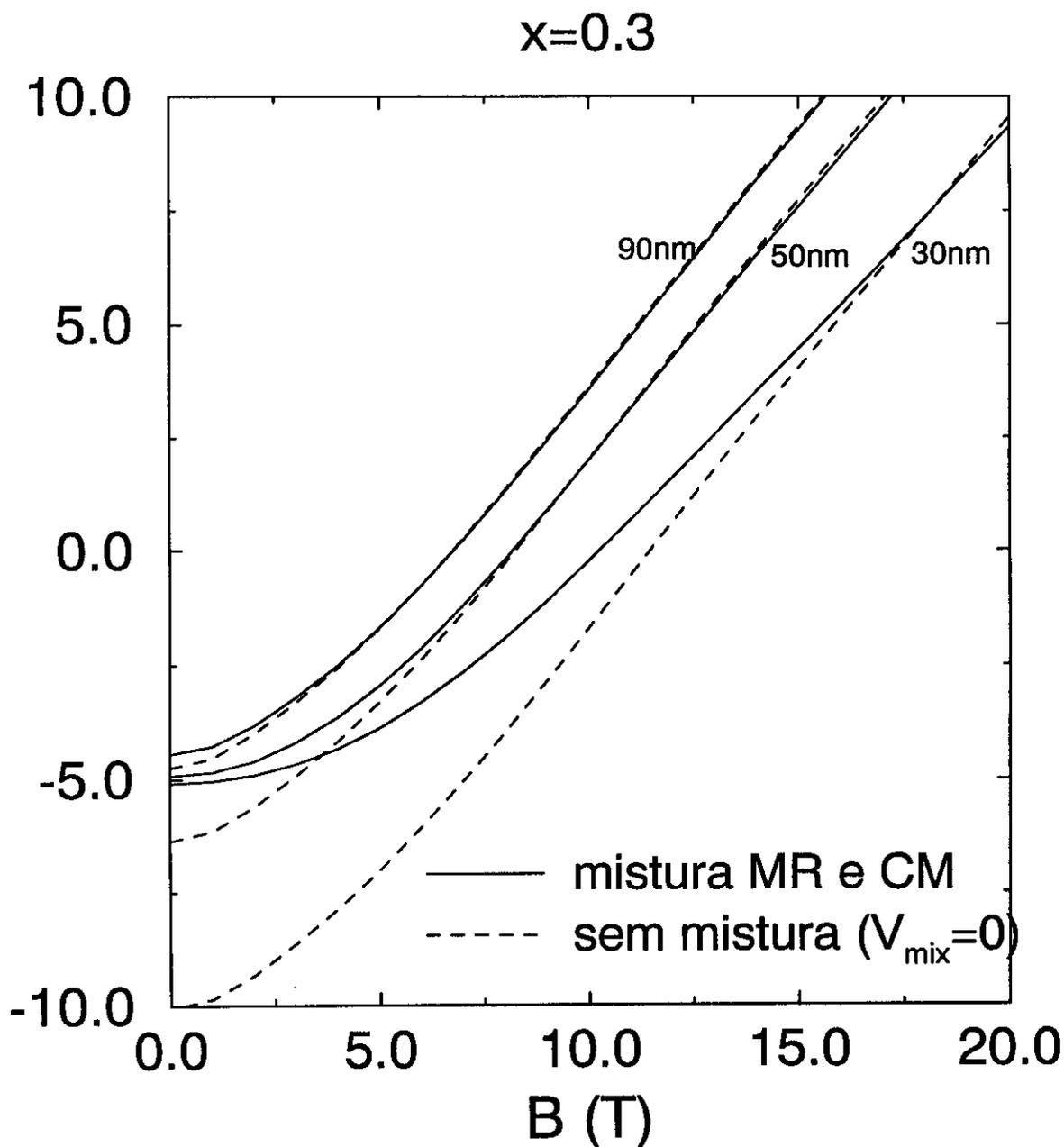


Figura 2.6: Dependência com o campo magnético da energia do exciton em um poço quântico com e sem o termo de mistura (V_{mix}) do movimento relativo e do CM. Este termo controla o comportamento 2D do exciton. A concentração de alumínio é $x=0,3$.

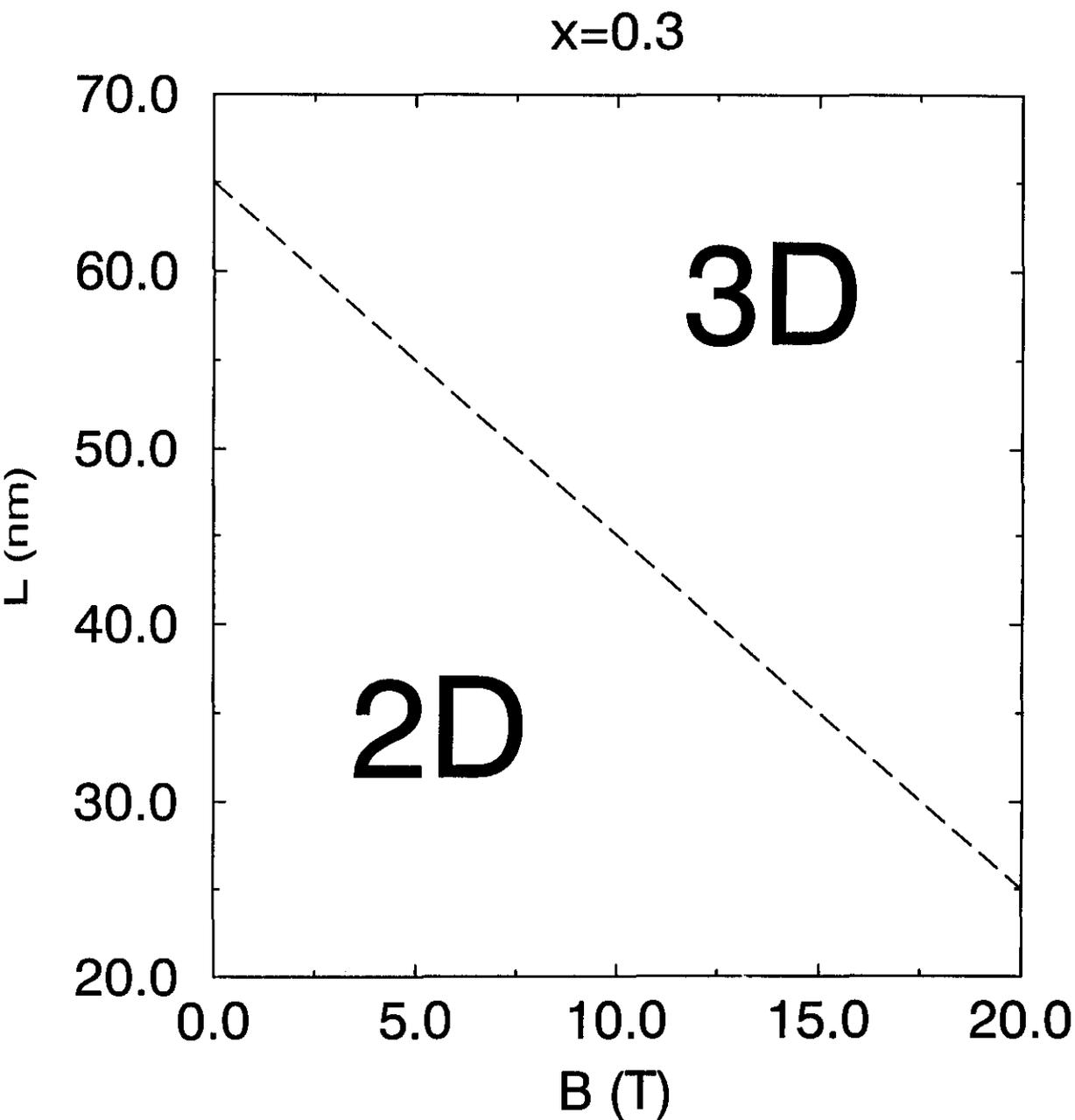


Figura 2.7: Regiões de comportamento 3D e 2D do exciton em função da largura do poço e do campo magnético aplicado.

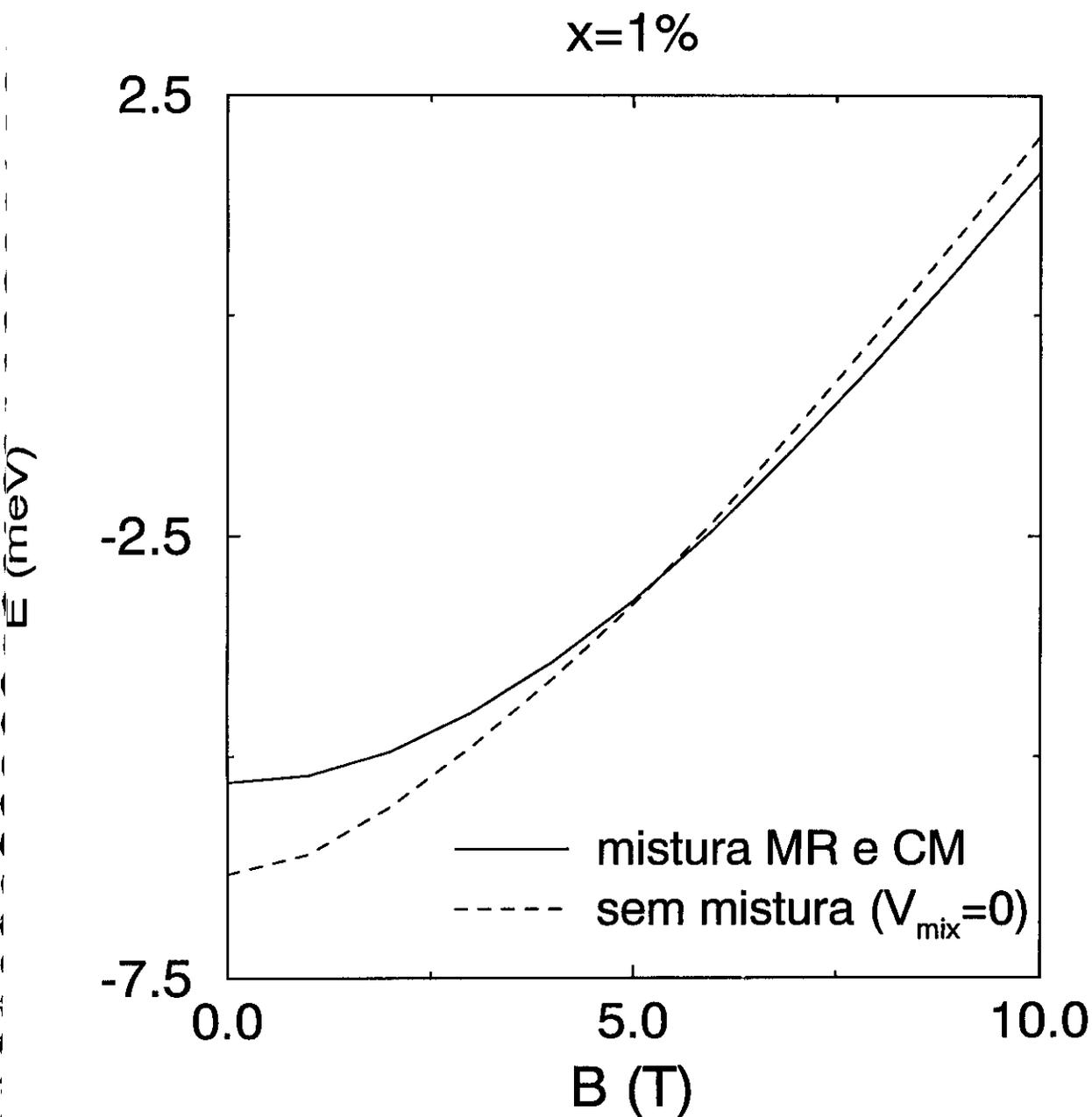


Figura 2.8: O mesmo que a figura 2.6 com a concentração de alumínio de 1% ($x=0.01$).

Os resultados de Fritze et al³⁸ são reproduzidos para $x=0.25\%$, onde uma transição entre o exciton do tipo 3D para um do tipo 2D pode ser vista quando o campo magnético cresce. Para concentrações maiores de alumínio um comportamento do tipo 2D para o exciton induzido pela barreira de potencial surge para campos magnéticos pequenos. Quando o campo magnético aumenta, a transição para o regime 3D ocorre e para campos magnéticos fortes a correlação elétron-buraco é quebrada pelo efeito do campo e outro regime 2D aparece. Para PQ rasos deve ser importante levar em consideração o efeito do contínuo de energia fora do poço no cálculo das energias. Verificou-se aqui, no entanto, que a medida que se aumenta a concentração de alumínio x , ou seja, a profundidade do poço, novos níveis de energia aparecem dentro do poço, mas no aparecimento destes níveis o valor da energia do estado fundamental não sofre alteração significativa.

2.4 Conclusões e perspectivas

Em resumo, foi estudado por um tratamento de CM e movimento relativo a dependência da energia do exciton em um PQ com campo magnético aplicado perpendicular a direção de crescimento. Neste sistema, a dependência com B é menor quando a largura do PQ diminui e o raio excitônico é diferente ao longo de cada direção. A densidade de probabilidade na direção do poço depende da posição do CM. O deslocamento magnético experimental foi reproduzido pelos nossos cálculos.

A transição do comportamento do exciton tipo 3D para 2D neste sistema foi confirmada, para PQ profundos e rasos. O acoplamento do CM e do movimento relativo pode ser controlada pela intensidade do campo magnético e sua dependência com a concentração de alumínio demonstra que, para PQ rasos, um novo regime dimensional aparece.

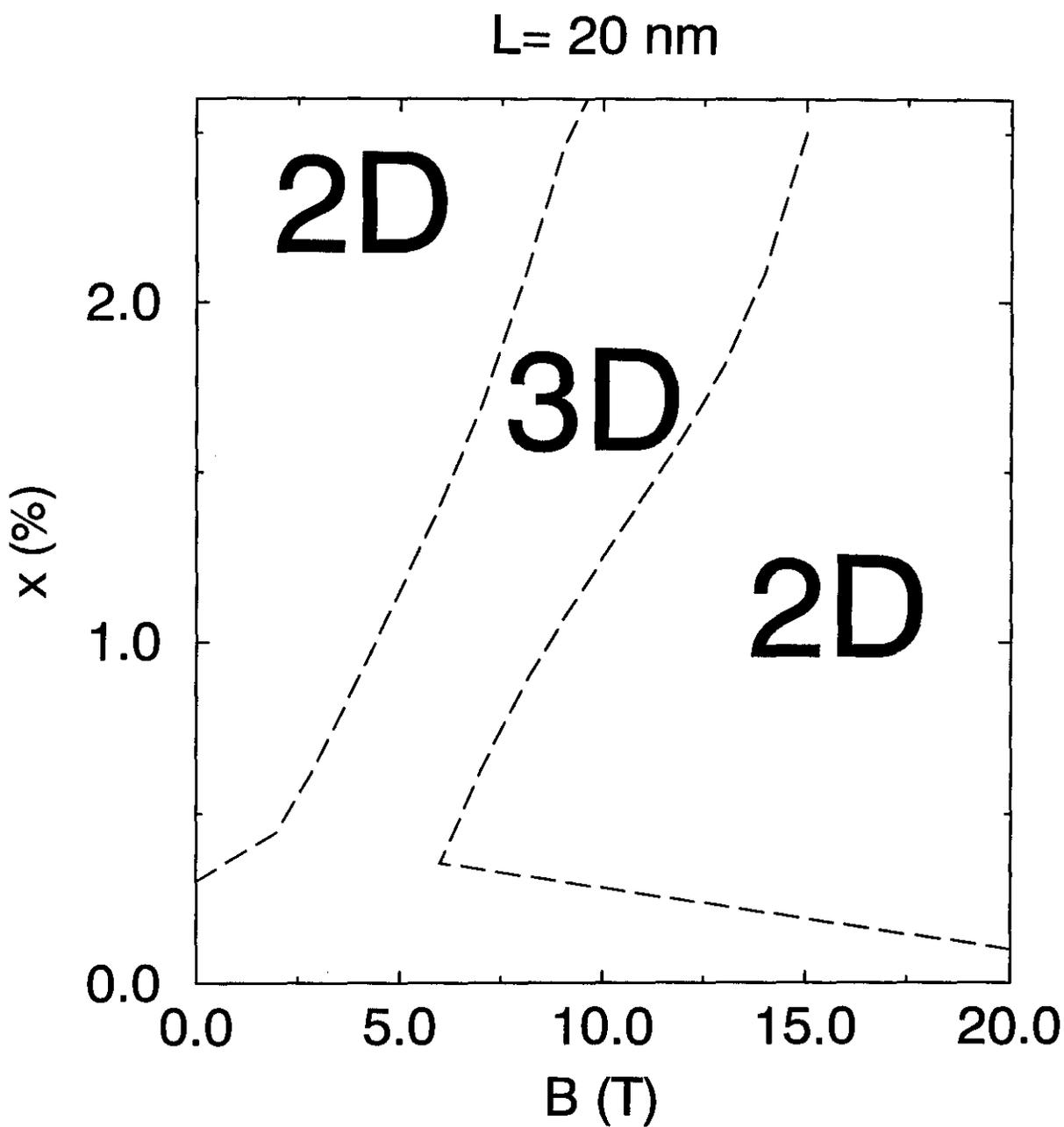


Figura 2.9: Comportamento 3D e 2D para o exciton em função da concentração de alumínio e da intensidade do campo magnético.

Capítulo 3

Caos quântico em impureza hidrogenóide magnética sujeita a confinamento parabólico

Nesta parte da tese é estudada uma impureza hidrogenóide quase tridimensional sob aplicação de um poço quântico parabólico em um campo magnético paralelo à direção do plano do poço. É feita uma investigação numérica da evolução dos níveis de energia e da estatística de níveis na transição do regime quântico regular ao regime caótico. A presença do campo magnético e do poço quebra o comportamento isotrópico 3D do problema. O cálculo da estatística dos níveis, não obedece a uma distribuição de Poisson e se aproxima de uma distribuição de Wigner (GOE).

3.1 Introdução

A manifestação de caos em sistemas quânticos é objeto de estudos de mais de uma década. No entanto, uma definição satisfatória ainda não foi encontrada e investigações gerais se concentram no estudo do comportamento de sistemas quânticos que apresentam uma dinâmica clássica caótica^{42,43}. No momento

parece claro que caos da maneira como é usualmente entendido, isto é, sensibilidade exponencial à perturbação, não é encontrada em sistemas quânticos isolados. Mas existem fenômenos que aparecem apenas quando o sistema clássico correspondente é caótico. A estabilidade da dinâmica clássica, em outras palavras quando esta é regular ou caótica, tem um efeito profundo no caráter do espectro quântico correspondente. Uma tentativa de caracterização de caos quântico é o aparecimento da distribuição para o espaçamento dos primeiros níveis vizinhos em energia próxima à distribuição de Poisson para energias onde a dinâmica clássica é regular, e próximo à distribuição de Wigner (GOE) para energias onde a dinâmica clássica é caótica, vários estudos independentes confirmam a validade deste critério ⁴⁴. Chamando $P(s)d(s)$ a probabilidade do espaçamento s entre os níveis de energia vizinhos estarem entre s e $s + ds$, tem-se que a distribuição de Poisson é dada por

$$P(s) = e^{-s}$$

e a distribuição de Wigner é (Fig. 3.1)⁴⁵

$$P(s) = 1/2\pi s e^{-\pi s^2/4}$$

Desta forma, muitos níveis com pequeno espaçamento s aparecem na distribuição de Poisson. Já para a distribuição de Wigner, o espaçamento entre os níveis está deslocado para valores maiores, uma consequência da repulsão entre os níveis vizinhos. As relação entre caos clássico e quântico foi estudada por vários autores em bilhares em estádios⁴⁶ (uma partícula presa dentro das paredes de um contorno bidimensional, como um estádio de futebol). Mas os primeiros resultados experimentais para um sistema quântico que apresenta uma dinâmica clássica caótica foram obtidos para o átomo de lítio sujeito a um campo magnético⁴⁷. No problema do átomo 3D, o comportamento caótico aparece devido a destruição pelo campo magnético da simetria rota-

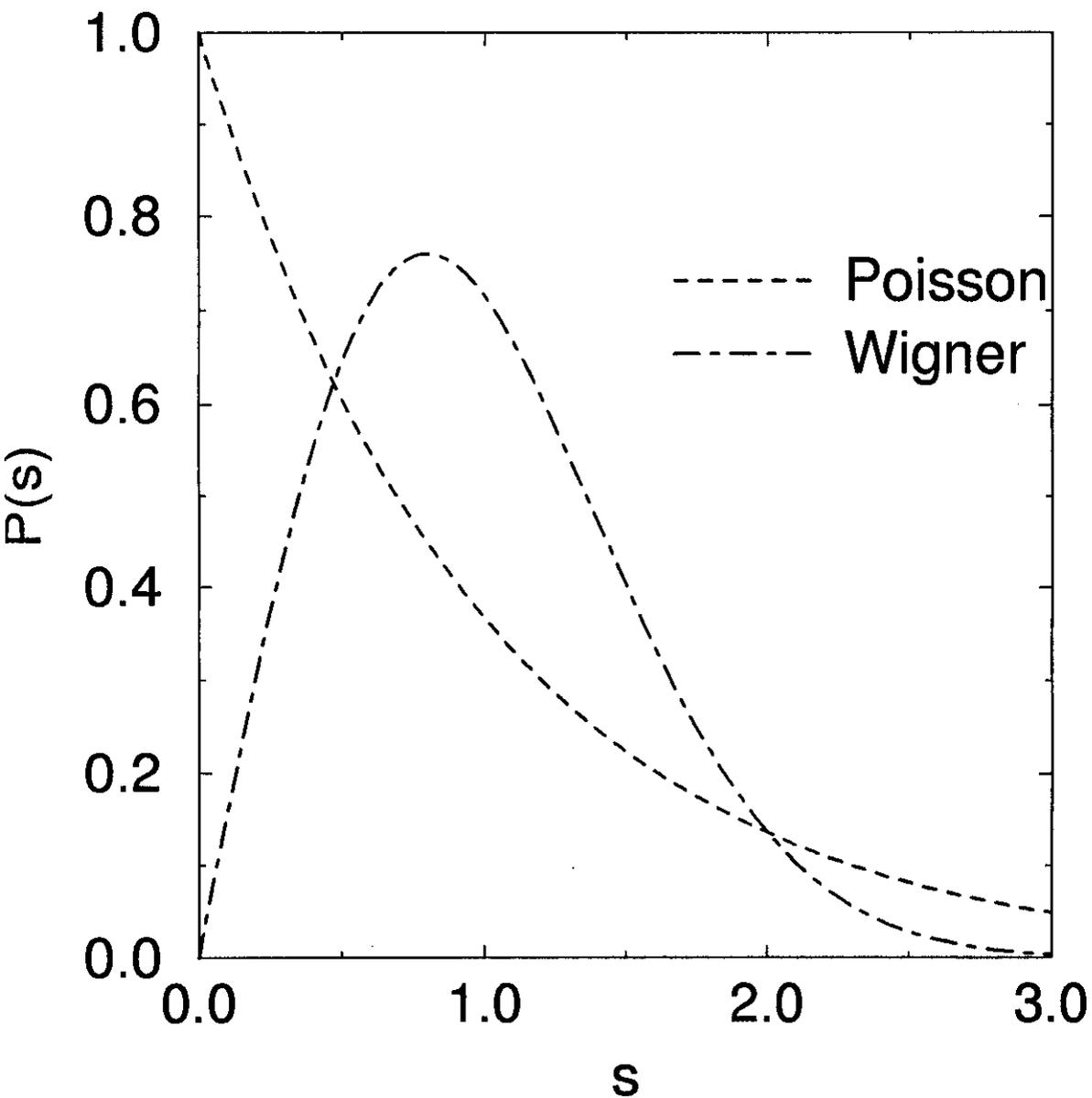


Figura 3.1: Distribuição de Poisson e de Wigner

cional que está associada com suas constantes de movimento^{48,49}.

Desenvolvimentos recentes em crescimento epitaxial e litografia submicron tornaram possível obter dispositivos mesoscópicos que apresentam uma dinâmica clássica caótica. Novos métodos de medidas vem possibilitando observar efeitos quânticos nestes sistemas de uma forma controlada. A conexão entre o regime clássico e o quântico é dada pelo fato que o comportamento caótico na dinâmica clássica se manifesta nas propriedades do correspondente espectro quântico de níveis de energia. Sendo assim, o primeiro passo no sentido de entender o comportamento caótico quântico é a análise de correlações no espectro de energia. A estatística de níveis mostra uma distribuição GOE (*Gaussian Orthogonal Ensemble*) quando o sistema apresenta uma dinâmica caótica no limite clássico.

O objetivo desta parte da tese é investigar a ocorrência de caos e sua manifestação em espectros quântico observáveis da impureza hidrogenóide confinada em um PQ e sujeita a um campo magnético. Com o controle no crescimento de amostras, estes sistemas apresentam grande flexibilidade para o estudo de manifestações de caos em sistemas quânticos. A seção 3.2 contém o modelo utilizado neste estudo, na seção 3.3 mostramos os resultados dos espectros e de algumas distribuições $P(s)$ para o sistema na presença de campo magnético e de confinamento parabólico. Finalmente as conclusões e perspectivas desta parte da tese aparecem na seção 3.4.

3.2 Teoria

São considerados estados eletrônicos de uma impureza hidrogenóide confinada em um poço de potencial parabólico. O centro atrativo de carga positiva representa tanto um buraco de valência localizado em flutuações do potencial ou uma impureza doadora no centro do poço. O campo magnético

é aplicado perpendicular à direção do confinamento do poço.

3.2.1 O operador hamiltoniano

O Hamiltoniano para um único elétron com massa m movendo-se no campo de um potencial atrativo coulombiano e em um campo magnético \mathbf{B} é dado por

$$H = \frac{(\mathbf{p} + \frac{\epsilon}{c}\mathbf{A})^2}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|\epsilon} + ky^2$$

onde $e^2/|\mathbf{r}|\epsilon$ é o potencial atrativo do doador (buraco localizado), ϵ é a constante dielétrica estática e ky^2 é o potencial de confinamento parabólico.

Tomando \mathbf{B} na direção do eixo z e usando um calibre simétrico $\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ temos

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{e\hbar}{2mc}\mathbf{L}_z \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2 B^2}{8mc^2}(x^2 + y^2) - \frac{e^2}{r\epsilon} + \frac{m\omega_y^2}{8}y^2$$

onde $\mathbf{L}_z = xp_y - yp_x$ e $\omega_y^2 = 8k/m$.

Usando unidades atômicas efetivas este hamiltoniano pode ser reescrito como

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{\gamma}{2}L_z + \frac{\gamma^2}{8}(x^2 + y^2) - \frac{1}{r} + \frac{\beta^2}{8}y^2$$

onde

$$\gamma \equiv \frac{B}{c}$$

$$\beta \equiv \omega_y$$

Com estas definições, o efeito produzido pelo campo magnético será ponderado pelo parâmetro γ e o efeito do confinamento parabólico será medido pelo valor de β . Em poços quânticos de semicondutoras, γ e β variam tipicamente entre 0 e 1.

3.2.2 A escolha da base

Para se obter uma estimativa razoável dos níveis de energia perto do limite de ionização, onde o comportamento caótico é esperado, é essencial se ter uma boa representação da função de onda em ambas as regiões: em r grande onde a influência do campo magnético é mais pronunciada; e em r pequeno, onde a função de onda dos estados excitados apresentam uma superposição com os estados próximos ao estado fundamental.

Para r grande, pouco se pode intuir sobre a forma da função de onda. Mas para r pequeno o potencial de Coulomb $-1/r$ domina sobre os demais e a dependência angular da função de onda pode ser tomada com uma forma harmônica esférica $Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

Já para a dependência radial, a escolha de uma base hidrogenóide discreta não é aconselhável, tendo-se em vista que esta base não é completa, não sendo capaz de incluir o contínuo de energia quando o elétron se encontra ionizado. Desta forma, o erro quando a energia se aproxima do limite de ionização se torna intolerável.⁵¹

A função de Sturmian

A base generalizada de Sturmian, introduzida inicialmente neste problema por Edmonds⁵¹ e mais tarde por Clark e Taylor⁵², não está sujeita às objeções citadas acima e ainda mantém a facilidade de representar as funções de Coulomb de maneira eficiente para r pequeno. A função radial de Sturmian $S_{nl}^{(\zeta)}$ é definida por

$$S_{nl}^{(\zeta)}(r) = \left(\frac{(n-l-1)!}{2(n+l)!} \right)^{1/2} (\zeta r)^{l+1} L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\zeta r) e^{-\zeta r/2}$$

onde $L_{n-l-1}^{(2l+1)}(\zeta r)$ são os polinômios associados de Laguerre, ζ é um parâmetro real positivo e $n = 1, 2, \dots, n_{max}$ é o número quântico principal onde n_{max} é o

n máximo considerado no espaço da matrix truncada.

Uma vantagem adicional da base de Sturmian vem da liberdade na escolha do valor do expoente ζ . O efeito de variar ζ acarreta apenas mudanças triviais nos elementos de matrix do hamiltoniano.

Podemos escrever a função de onda $\Psi(\mathbf{r})$ na base de Sturmian como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{nl} r^{-1} \psi_{nl} S_{nl}^{(\zeta)}(r) \mathbf{Y}_{lm}(\theta, \varphi)$$

onde ψ_{nl} são coeficientes a determinar.

Uma desvantagem menor de se usar a base de Sturmian vem do fato que sendo $S_{nl}^{(\zeta)}(r)$ ortogonal quando multiplicada por r^{-1}

$$\int_0^\infty \frac{dr}{r} S_{nl}^{(\zeta)}(r) S_{n'l'}^{(\zeta)}(r) = \delta_{nn'}$$

a matriz de *overlap* $B_{nl,n'l'} = \langle \Psi | \Psi \rangle$

$$B_{nl,n'l'} = \delta_{ll'} \int_0^\infty dr S_{nl}^{(\zeta)}(r) S_{n'l'}^{(\zeta)}(r)$$

não é diagonal em n . Desta forma, na solução dos coeficientes ψ_{nl} deve-se resolver um problema generalizado de autovalores

$$H\Psi = E\Psi B$$

onde H e B são respectivamente o Hamiltoniano e a matriz de superposição na base de Sturmian.

3.2.3 Os elementos de matrix

Os polinômios associados de Laguerre obedecem as relações de recorrência

$$L_n^{(\alpha)}(x) = L_n^{(\alpha+1)}(x) - L_{n-1}^{(\alpha+1)}(x)$$

$$xL_n^{(\alpha)}(x) = (2n + \alpha + 1)L_n^{(\alpha)}(x) - (n + \alpha)L_{n-1}^{(\alpha)}(x) - (n + 1)L_{n+1}^{(\alpha)}(x)$$

e têm a seguinte propriedade de ortogonalidade

$$\int_0^{\infty} e^{-z} x^{\alpha} L_n^{(\alpha)}(x) L_{n'}^{(\alpha)}(x) dx = \frac{(n + \alpha)!}{n!} \delta_{nn'}$$

onde $n, m = 0, 1, 2, \dots$

Dessas relações pode-se obter uma forma simples para a matriz de superposição na base de funções de Sturmian para um expoente ζ comum

$$B_{nl, n'l'} = \int_0^{\infty} S_{nl}^{(\zeta)}(r) S_{n'l'}^{(\zeta)}(r) dr$$

Esta matriz $B_{nl, n'l'}$ toma a forma simples

$$\begin{array}{lll} \frac{n}{\zeta} & n' = n & l = l' \\ -\frac{1}{2}\zeta [(n + l + 1)(n - l)]^{1/2} & n' = n + 1 & l = l' \\ 0 & & l \neq l' \end{array}$$

Também pode-se escrever os elementos de matriz do potencial quadrático magnético, onde $(x^2 + y^2) = r^2 \sin^2 \theta$, na forma

$$Q_{nl, n'l'} = \int_0^{\infty} S_{nl}^{(\zeta)}(r) r^2 S_{n'l'}^{(\zeta)}(r) dr$$

e estes elementos são não nulos apenas para $|n - n'| = 0, 1, 2, 3$ e $|l - l'| = 0, 2$.

No caso de $|l - l'| = 2$ tem-se para $Q_{nl, n'l+2}$

$$-\frac{1}{2}\zeta^{-3}[(n-l-1)(n-l-2)(n-l-3)(n-l-4)(n-l-5)(n+l)]^{1/2} \quad n' = n - 3$$

$$\zeta^{-3}(3n+2l)[(n-l-1)(n-l-2)(n-l-3)(n-l-4)]^{1/2} \quad n' = n - 2$$

$$-\frac{5}{2}\zeta^{-3}(3n+l)[(n-l-1)(n-l-2)(n-l-3)(n+l+1)]^{1/2} \quad n' = n - 1$$

$$10n\zeta^{-3}[(n+l+1)(n+l+2)(n-l-1)(n-l-2)]^{1/2} \quad n' = n$$

$$-\frac{5}{2}\zeta^{-3}(3n-l)[(n+l+3)(n+l+2)(n+l+1)(n-l-1)]^{1/2} \quad n' = n + 1$$

$$\zeta^{-3}(3n-2l)[(n+l+4)(n+l+3)(n+l+2)(n+l+1)]^{1/2} \quad n' = n + 2$$

$$-\frac{1}{2}\zeta^{-3}[(n+l+5)(n+l+4)(n+l+3)(n+l+2)(n+l+1)(n-l)]^{1/2} \quad n' = n + 3$$

e para $|l - l'| = 0$ tem-se $Q_{nl, n'l}$

$$2n\zeta^{-3}[5n^2 - 3l(l+1) + 1] \quad n' = n$$

$$-\frac{3}{2}\zeta^{-3}[5n(n+1) - l(l+1) + 2][(n+l+1)(n-l)]^{1/2} \quad n' = n + 1$$

$$3\zeta^{-3}(n+1)[(n+l+1)(n-l)(n+l+2)(n-l+1)]^{1/2} \quad n' = n + 2$$

$$-\frac{1}{2}\zeta^{-3}[(n+l+1)(n+2-l)(n-l)(n+l+3)(n+l+2)(n+1-l)]^{1/2} \quad n' = n + 3$$

Para a energia cinética e o potencial coulombiano

$$H' \equiv -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}$$

usando a equação 2.6 da Ref. 51 obtém-se

$$H' = \frac{1}{r}(n-1) - \frac{1}{2}$$

e os elementos de matriz $P_{nl,n'l'} \equiv \langle \Psi | H' | \Psi \rangle$ têm a forma

$$P_{nl,n'l'} = \frac{1}{2} (n-1) \delta_{nn'} \delta_{ll'} - \frac{1}{2} B_{nl,n'l'} \delta_{ll'}$$

Finalmente para o confinamento do poço quântico de potencial parabólico pode-se escrever $y^2 = r^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi$ e definindo $R_{nlm,n'l'm'} \equiv \langle \Psi | y^2 | \Psi \rangle$ obtém-se resultado não nulo apenas para $m = 0$, $l = l'$ e $n = n'$ ou $n = n' + 1$. Explicitamente:

$$R_{n0,n0} = \frac{1}{2} \frac{n}{\zeta} \left\{ 1 - \frac{1}{(2l+1)} \left[\frac{l^2}{2l-1} + \frac{(l+1)^2}{2l+3} \right] \right\}$$

$$R_{n0;n+1,l,0} = -\frac{1}{4} \frac{1}{\zeta} \left[(n-l)(n+l+1)^{1/2} \right] \left\{ 1 - \frac{1}{(2l+1)} \left[\frac{l^2}{2l-1} + \frac{(l+1)^2}{2l+3} \right] \right\}$$

As funções da base podem ser ordenadas de modo que H e B sejam matrizes banda e tridiagonais respectivamente. Este esquema de ordenação é na prática o mais conveniente separando o espaço em dois subespaços para l 's pares e ímpares. O procedimento geral consiste em ordenar (n, l) na forma

$$(1, 0), (2, 0), (3, 0), (3, 2), (4, 0), (4, 2), (5, 0), (5, 2), (5, 4), \dots, (n_{\max}, n_{\max} - 1)$$

para o subespaço dos l 's pares. Esta ordem leva a matriz completa H a ter a estrutura de bloco da figura 3.2.

3.3 Resultados

O método convencional para se resolver o problema generalizado de autovalores $H\Psi = E\Psi B$, pelo método da decomposição de Cholesky da matriz de superposição B , destrói a característica banda de H no primeiro estágio. Isto restringe consideravelmente o tamanho possível das matrizes envolvidas no cálculo. No entanto, um algoritmo foi desenhado por Crawford⁵³ para a

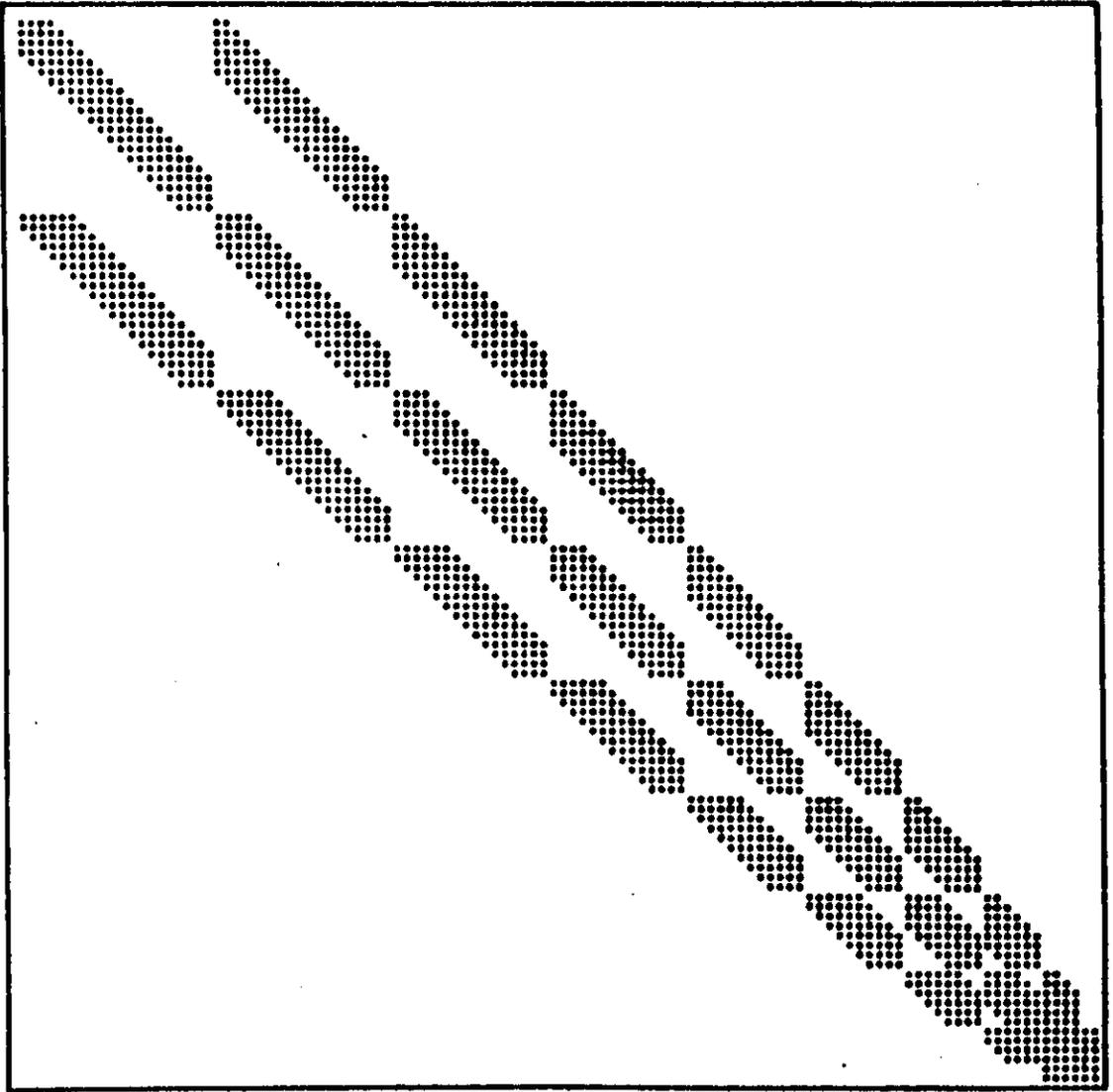


Figura 3.2: Elementos de matriz não nulos para o operador Hamiltoniano H no subespaço dos l 's pares, $n_{max} = 20$ e ordenando a base como é explicado no texto.

determinação dos autovalores de um problema quando H e B são matrizes banda. Uma versão deste algoritmo pode ser encontrada na biblioteca computacional *NAG*. Desta forma é possível usar neste problema uma base em dupla precisão com aproximadamente 3000 funções de Sturmian utilizando uma memória de 32 MBytes.

A convergência de um dado cálculo é determinada pela observação da estabilidade dos níveis de energia com respeito à variação do tamanho da base e do valor de ζ .

Na ausência do confinamento parabólico o hamiltoniano H descreve um átomo de hidrogênio em um campo magnético. Neste caso, o momento angular L_z é uma constante de movimento, e a energia linear do efeito Zeeman $\frac{\gamma}{2}L_z$ não tem implicação efetiva na dinâmica do sistema, mas seu efeito é apenas de um deslocamento para todos os níveis de energia com a mesma projeção do momento angular orbital $m = L_z$, e assim pode ser visto como um reposicionamento do zero de energia. No caso de confinamento fraco (β pequeno) este argumento continua aproximadamente válido, e o cálculo para $L_z = 0$ não leva a erros apreciáveis nos resultados. Com isto em mente, nos cálculos dos níveis de energia foi considerado apenas momento angular nulo.

Primeiro é estudado o efeito do campo magnético na impureza hidrogenóide na ausência de confinamento $\beta = 0$. Na figura 3.3 é mostrado o espectro de energia em função do campo magnético (γ) variando o número quântico principal $n = 7, 8, 9, 10, 11$ para o subespaço dos l 's pares. Para campo magnético nulo, os valores da energia convergem para os valores do cálculo exato das energias da impureza hidrogenóide sem confinamento e sem campo

$$E = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^2} \text{Hartree}$$

Com a aplicação do campo magnético observa-se quebra da degenerescência

$\beta = 0$ (sem confinamento)

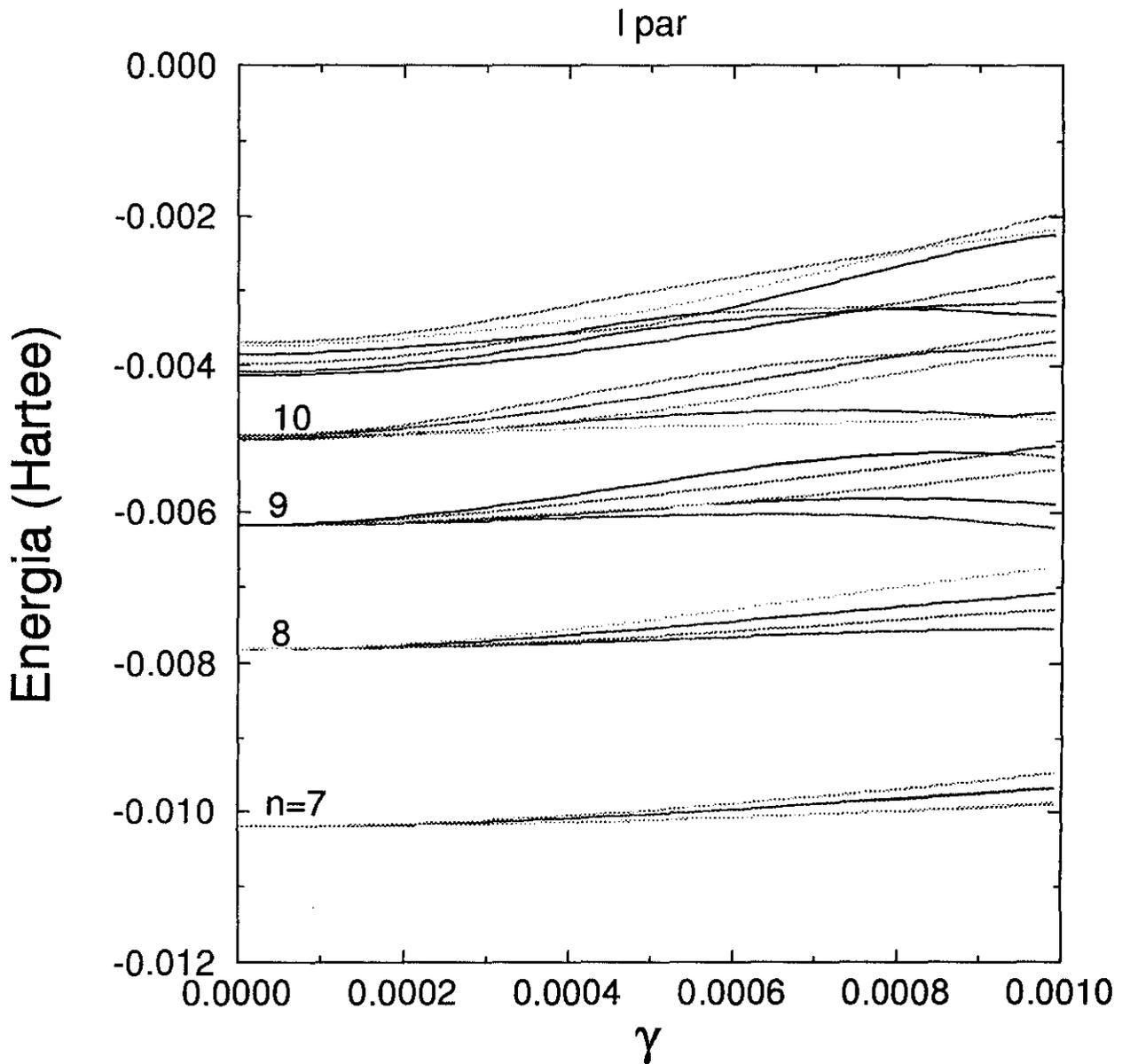


Figura 3.3: Vinte e três (entre os trinta primeiros) níveis de energia em função do campo magnético γ na ausência de confinamento $\beta = 0$.

devida ao efeito diamagnético $\gamma^2(x^2 + y^2)/8$ e o espectro se torna um pouco complicado para números quânticos grandes, onde é possível observar um certo grau de repulsão entre os níveis de energia, que é uma manifestação da destruição da simetria da dinâmica do sistema pelo campo. Esta repulsão entre os níveis, como foi discutido na Introdução, pode representar uma dinâmica caótica. Este comportamento caótico é parcialmente confirmado pela distribuição $P(s)$ dos primeiros vizinhos de energia s da figura 3.4 para o campo magnético $\gamma = 0.001$. A distribuição com confinamento zero não parece obedecer a distribuição de Poisson e também não obedece a distribuição de Wigner (GOE), mas parece estar em uma situação intermediária entre estas duas distribuições. Segundo alguns autores⁵⁴, isto caracteriza uma região de transição entre uma dinâmica regular e uma dinâmica caótica. A convergência do espectro, no entanto, é bastante sensível ao tamanho da base, e os detalhes da distribuição não podem ser vistos devido ao pequeno número de níveis no cálculo.

Na figura 3.5 é mostrado o espectro de energia considerando um confinamento finito $\beta = 1$. Neste caso, para campo nulo ($\gamma = 0$) já aparece uma quebra na degenerescência dos níveis de energia devido a quebra da simetria da impureza hidrogenóide pelo poço. As degenerescências restantes são removidas com a aplicação do campo magnético. Novamente é possível observar a repulsão entre os níveis de energia para n grande.

Construindo a distribuição de energia para $\gamma = 0.001$ (Fig. 3.6) é possível observar que o comportamento desta distribuição se aproxima ao comportamento da distribuição de Wigner (GOE), que é uma característica esperada para sistemas quânticos com uma dinâmica clássica caótica.

apenas campo (sem confinamento)

$$\gamma=0.001 \text{ e } \beta=0$$

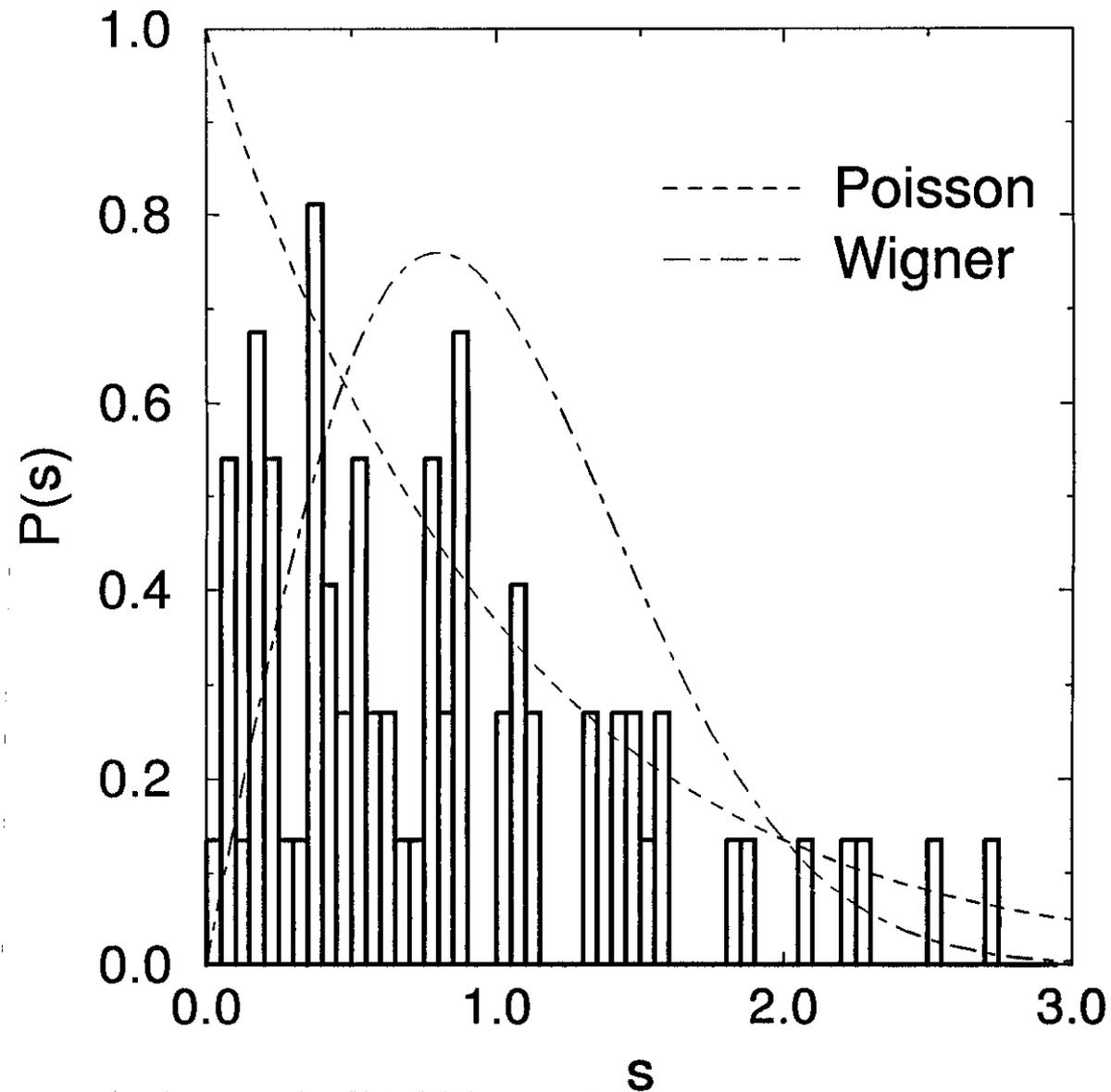


Figura 3.4: Distribuição dos primeiros vizinhos em energia em função do espaçamento de energia dos níveis para o campo magnético $\gamma = 0.001$ e **sem confinamento** $\beta = 0$ para o subespaço dos l 's pares.

$\beta = 1$ (com confinamento)

l par

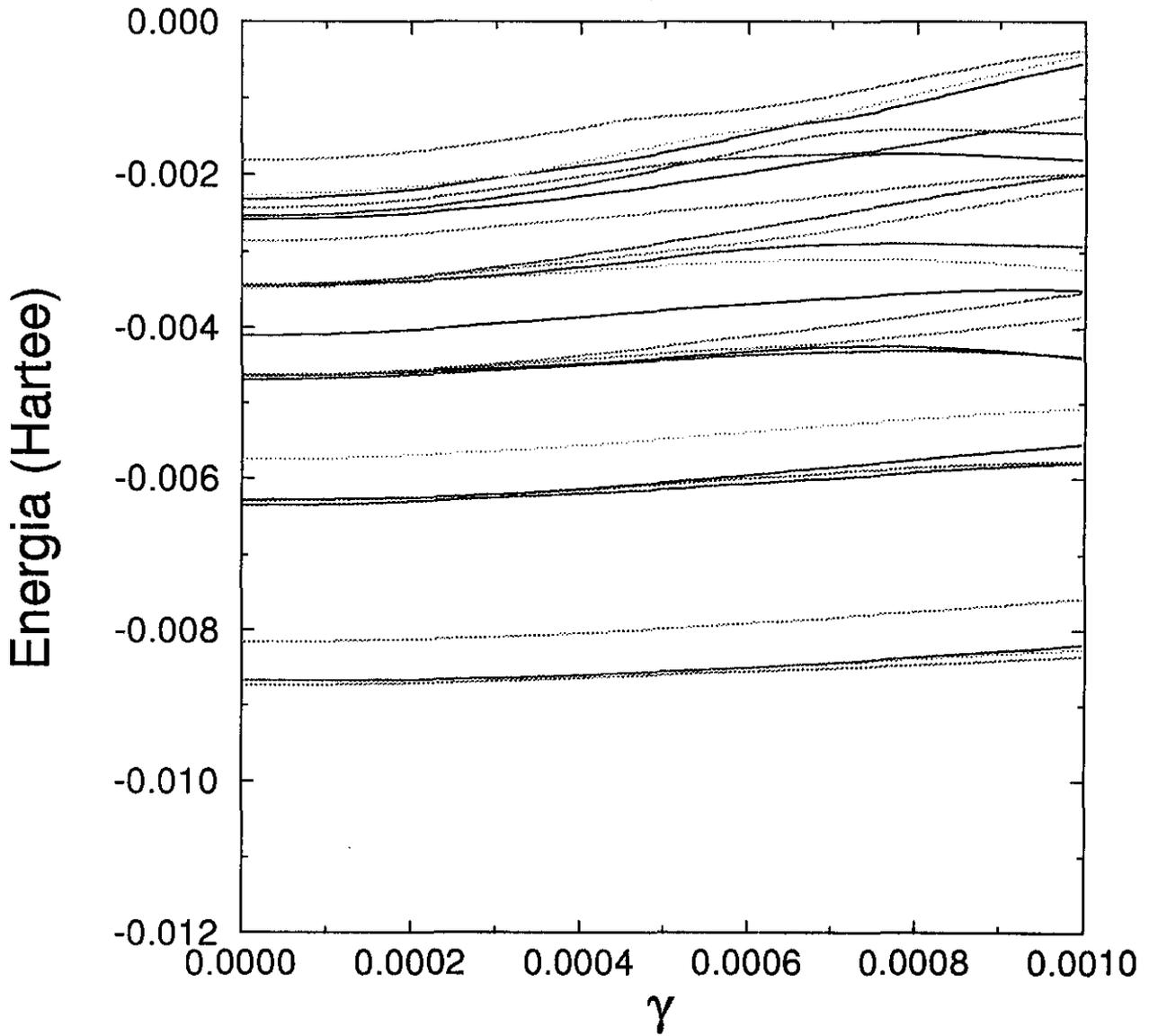


Figura 3.5: Vinte e três (entre os trinta primeiros) níveis de energia em função do campo magnético γ na presença de confinamento $\beta = 1$.

campo e confinamento

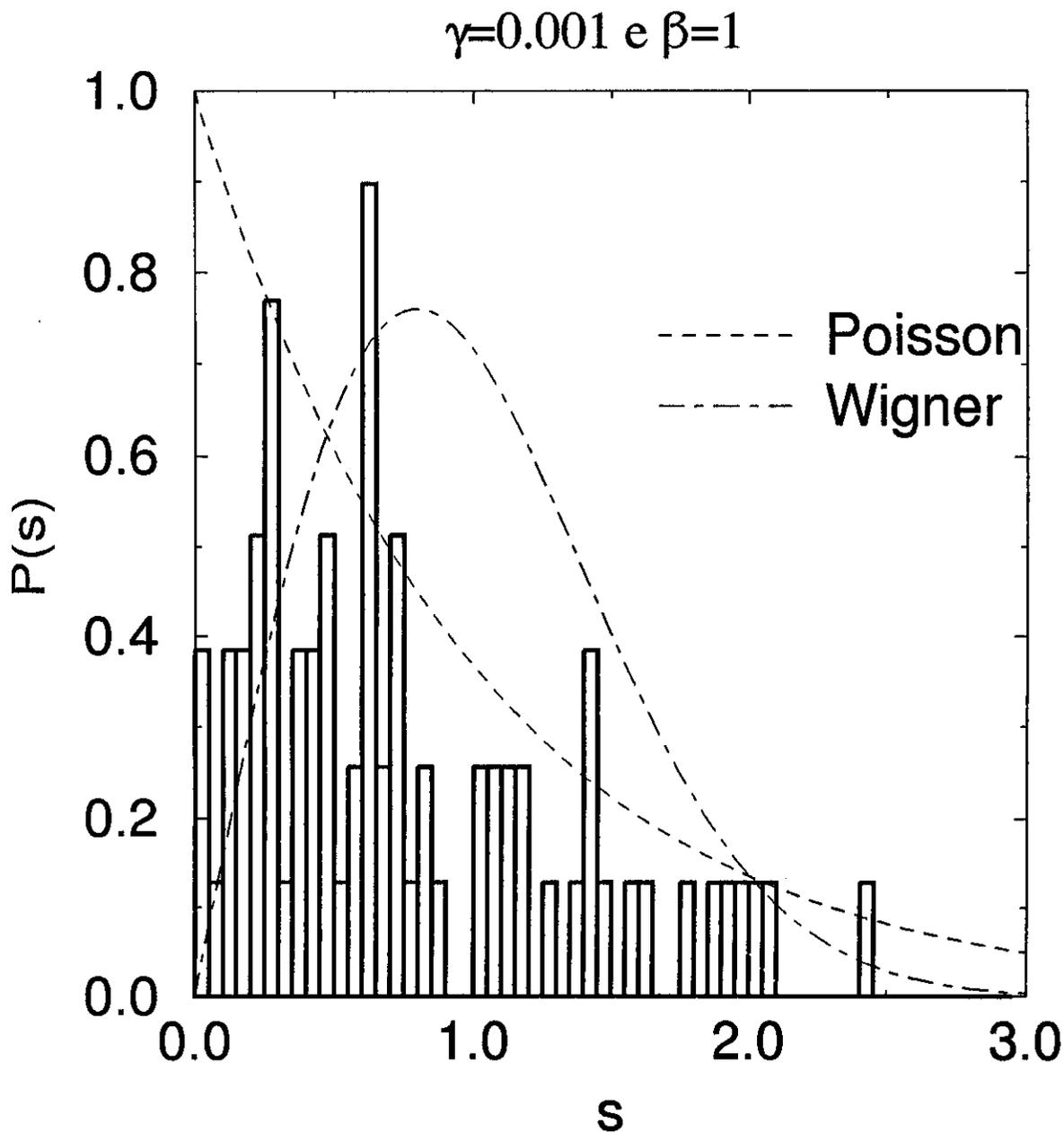


Figura 3.6: Distribuição dos primeiros vizinhos em energia em função espaçamento de energia dos níveis para o campo magnético $\gamma = 0.001$ com confinamento $\beta = 1$ para o subespaço dos l 's pares.

3.4 Conclusões

Em resumo, nesta parte da tese foi investigado o problema de uma impureza em um potencial coulombiano no centro de um poço quântico de potencial parabólico em um campo magnético *no-plano* como um modelo para doadores e excitons localizados em poços quânticos.

Foi mostrado que o efeito do confinamento em impurezas hidrogenóides leva a um problema complexo, com efeitos dinâmicos caóticos.

Os efeitos caóticos se manifestam no espectro dos níveis de energia e nas distribuições de primeiros vizinhos destes níveis.

O regime caótico também é muito importante em transporte a baixas energias em poços quânticos com impurezas e na recombinação excitônica em poços quânticos.

Devido a faixa de energia que estes efeitos se manifestam, eles podem ser observados experimentalmente em espectros de absorção do infra-vermelho longínquo. Isto pode ser feito, por exemplo, estudando amostras de poços quânticos semicondutores levemente dopados intencionalmente. A habilidade de dopar em uma região estreita (dopagem- δ), permite obter uma situação similar a estudada aqui. Até o momento, estudos neste tipo de amostra tem-se concentrado nos níveis fundamentais, ver referência 55. Investigação experimental dos níveis com elevado número quântico permanece ainda um tema em aberto.

Capítulo 4

Conclusão Final

Nesta tese foram estudados os efeitos da dimensionalidade (3D-2D) nos estados coulombianos na presença de um campo magnético forte em poços quânticos de *GaAs/(Ga, Al)As*.

Nossos resultados evidenciaram a forte anisotropia no magneto-exciton quando um campo magnético é aplicado perpendicularmente à direção de crescimento. A comparação com os resultados experimentais mostrou que o magneto-exciton, nesta configuração, é bem descrito através do confinamento e acoplamento do magneto-exciton 3D pelo poço quântico. Nossos resultados sugerem que este método pode ser utilizado para estruturas com confinamento com mais de uma dimensão⁵⁶.

Mostramos também que no regime de estados próximos da ionização, os estados de impureza representam uma distribuição de níveis de energia próxima à distribuição de Wigner (GOE). Esta assinatura é um reflexo da dinâmica clássica caótica desse sistema, que ocorre devido à quebra das simetrias provocadas pelos potenciais do poço e do campo magnético. Esta distribuição de níveis deve dominar espectros na região do infra-vermelho longínquo. Recentemente técnicas de alta resolução foram desenvolvidas para o estudo de transições internas dos magneto-excitons em poços quânticos^{57,58}.

Podemos esperar que em breve estes estados, próximos da ionização, possam ser investigados experimentalmente. A possibilidade de alterar o grau de confinamento e a dimensionalidade, a intensidade da interação coulombiana (através da aplicação de um campo elétrico), etc., torna este sistema particularmente atraente para estudos fundamentais. Temos aqui um bom protótipo para investigações teórico-experimentais de conceitos relacionados com o "caos quântico". Estes trabalhos estão ainda na sua fase inicial e uma investigação detalhada, explorando estruturas e configurações diferentes devem ser realizadas em paralelo às investigações experimentais.

Bibliografia

- [1] Esaki L. e Tsu R., IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970).
- [2] Esaki L. e Chang L. L., Phys. Rev. Lett. **33**, 495 (1974).
- [3] Kelly M. J., "Low-Dimensional Semiconductors", Oxford Sc. Publ. (1995).
- [4] Prange R. E. e Girvin S. M., "The Quantum Hall Effect", Springer-Verlag (1990).
- [5] Bastard G., Phys. Rev B **24**, 4717 (1981).
- [6] Bastard G., Phys. Rev. B **24**, 5693 (1982) e Phys. Rev B **25** 7584 (1982).
- [7] White S. e Sham L. J., Phys Rev Lett. **47**, 879 (1981).
- [8] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang, and L. Esaki, Phys. Rev. B **26**, 1974 (1982).
- [9] R. L. Greene and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **31**, 6498 (1985).
- [10] S. E. Yang and L.J.Sham, Phys. Rev. Lett. **58**, 2598 (1987).
- [11] G. Bauer and T. Ando, Phys. Rev. B **37**, 3130 (1988).
- [12] G. Bauer and T. Ando, Phys. Rev. B **38**, 6015 (1988).

- [13] A. V. Kavokin, A. I. Nesvizhskii, and R. P. Seisyan, *Semiconductors* **37**, 530 (1993).
- [14] S. Zivanovic, V. Milanovic, and Z. Ikonc, *Phys Rev B* **52**, 8305 (1995).
- [15] P. Peyla, R. Romestain, Y. Merle d 'Anbigné, G. Fishman, A. Wasiela, and H. Mariette, *Phys. Rev. B* **52**, 12026 (1995).
- [16] L. Viña, G. Bauer, M. Potemski, J. C. Maan, E. E. Mendez, and W. I. Wang, *Phys. Rev. B* **41**, 10767 (1990).
- [17] Y. Iimura, Y. Segawa, G. Bauer, M. M. Lin, Y. Aoyagi, and S. Namba, *Phys. Rev. B* **42**, 1478 (1990).
- [18] N. D. II 'inskaya, S. I. Kokhanovskii, and R. P. Seisyan, *Semiconductors* **27**, 57 (1993).
- [19] T. Yasui and Y Segawa, *Physica B* **184**, 119 (1993)
- [20] V. D. Kulakovskii, A. Forchel, K. Pieger, and J. Straka, *Phys. Rev. B* **50**, 7467 (1994).
- [21] T. Yasui, Y. Segawa, Y. Aoyagi, Y Iimura, G. Bauer, I. Mogi, and G. Kido, *Phys. Rev B* **51**, 9813 (1995).
- [22] P. V. Fiugno, A. L. Convertino, R. Rinaldi, R. Cingolani, J. Massies, and M. Leroux, *Phys. Rev. B* **52**, 11591 (1995).
- [23] P. E. Simmonds, M. J. Birkett, M. S. Skolnick, W. I. E. Tagg, and P. Sobkowicz, *Phys Rev. B* **50**, 11251 (1994).
- [24] M. Bayer, A. A. Dremin, V. D. Kulakovskii, A. Forchel, F. Faller, P. A. Knipp, and T. L. Reinecke, *Phys. Rev. B* **52**, 14728 (1995).

- [25] G. Platero and M. Altarelli, *Phys. Rev. B* **39**, 3758 (1989).
- [26] J. Yoshino, H. Sakaki, and T. Hotta, *Surf. Sci.* **142**, 326 (1984).
- [27] J. A. Brum, L. L. Chang, and L. Esaki, *Phys. Rev. B* **38**, 12977 (1988).
- [28] G. Goldoni, and A. Fasolino, *Phys. Rev. B* **48**, 4948 (1993).
- [29] D. R. Yakovlev, G. Mackh, B. Kuhn-Heinrich, W. Ossau, A. Waag, G. Landwehr, R. Hellmann, and E. O. Gobel, *Phys. Rev. B* **52**, 12033 (1995).
- [30] N. J. Pulsford, J. Singleton, R. J. Nicholas, and C. T. B. Foxon, *J. de Physique* **48**, C5-231 (1987)
- [31] A. Fasolino, G. Platero, M. Potemski, J. C. Maan, K. Ploog, and G. Weimann, *Surf. Sci.* **267**, 509 (1992).
- [32] T. Someya, H. Akiyama, and H. Sakaki, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3664 (1995).
- [33] J. B. Xia and W. J. Fan, *Phys. Rev. B* **40**, 8508 (1989).
- [34] J. B. Xia and K. Huang, *Phys. Rev. B* **42**, 11884 (1990).
- [35] A. D 'Andrea and R. Del Sole, *Phys. Rev B* **46**, 2363 (1992).
- [36] N. Tomassini and A. D 'Andrea, *Phys. Rev. B* **51**, 5005 (1995).
- [37] I. Brener, W. H. Knox, K. W. Groossen, and J. E. Cunningham, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 319 (1993).
- [38] M. Fritze, I. E. Perakis, A. Getter, W. Knox, D. W. Groossen, J. E. Cunningham, and S. A. Jackson, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 106 (1996).

- [39] J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
- [40] Altarelli and Lipari, *Phys. Rev. B* **9**, 1733 (1974).
- [41] S. Park and O'D. Kwon, *J. Appl. Phys.* **79**, 3267 (1996).
- [42] Gutzwiller M. C., *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Berlin: Springer (1990).
- [43] Ozório de Almeida A. M., *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantisation*, Cambridge: Cambridge University Press (1988).
- [44] Hegerfeldt G. C. e Henneberg R., *Phys. Rev. A* **41**, 1161 (1990) e referências citadas por esta.
- [45] Friedrich H. e Wintgen D., *Phys. Rep.* **183** (2), 37 (1989).
- [46] M. A. M. de Aguiar, *Phys. Rev E* **53**, 4555 (1996) e referências citadas por esta.
- [47] Chun-ho Iu, Welch G. R., Kash M. M., Kleppner D., Delande D. e Gay J. C., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 145 (1991).
- [48] Delande D. e Gay J. C., *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2006 (1986).
- [49] Delande D., Bommier A. e Gay J. C., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 141 (1991).
- [50] Hawrylak P. e Grabowski M., *Phys. Rev. B* **49**, 8174 (1994).
- [51] Edmonds A. R., *J. Phys. B* **6**, 1603 (1973).
- [52] Clark C. W. e Taylor K. T., *J. Phys. B* **15**, 1175 (1982).
- [53] Crawford C. B., *Commun. Assoc. Comput. Mach.* **16**, 41 (1973).
- [54] M. V. Berry e M. Robnik, *J. Phys. A* **17**, 2413 (1984).

- [55] Nguyen N., Ranganathan R., McCombe B. D. e Rustgi M. L., *Phys. Rev. B* **45**, 11166 (1992).
- [56] M. V. Marquesini, M. J. S. P. Brasil, M. A. Cotta, J. A. Brum e A. A. Bernussi, *Phys. Rev B* **53**, R 16156 (1996).
- [57] J. Cerre, J. Kono, M. S. Sherwin, M Sundoram, A. C. gossard e G. Bauer, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1131 (1996).
- [58] M. S. Salib, H. A. Nickel, G. S. Herold, A. Petrov, B. D. McCombe, R. Chen, K. K. Bajaj e W. Schaff, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1135 (1996).

Apêndice A

Elementos de matriz

Calculando os elementos de matriz para s ($m=0$):

$$\langle g_o(\gamma'_o) | g_o(\gamma_o) \rangle = B_{\gamma'_o\gamma_o} = \frac{2\gamma_o\gamma'_o}{\gamma_o'^2 + \gamma_o^2}$$

$$\langle \chi_o(\alpha'_o) | \chi_o(\alpha_o) \rangle = B_{\alpha'_o\alpha_o} = \left(\frac{2\alpha'_o\alpha_o}{\alpha_o'^2 + \alpha_o^2} \right)^{1/2}$$

$$\langle \varphi_o | T_{\rho\phi} | \varphi_o \rangle = \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{\gamma_o^3\gamma_o'^3}{(\bar{\gamma}_o^2)^2} B_{\alpha'_o\alpha_o}$$

onde

$$\bar{\gamma}_o^2 = \gamma_o'^2 + \gamma_o^2$$

$$\langle \varphi_o | T_z | \varphi_o \rangle = \frac{\hbar^2}{\mu} \left(\frac{2\alpha'_o\alpha_o}{(\bar{\alpha}_o^2)^3} \right)^{1/2} \alpha_o'^2\alpha_o^2 B_{\gamma'_o\gamma_o}$$

$$\langle \varphi_o | H_\rho | \varphi_o \rangle = \frac{e^2 H^2}{c^2 \mu} \frac{\gamma_o\gamma_o'}{(\bar{\gamma}_o^2)^2} B_{\alpha'_o\alpha_o}$$

$$\langle \varphi_o | H_\phi | \varphi_o \rangle = 0$$

$$\langle \varphi_o | T_r + V_b | \varphi_o \rangle = B_{\alpha'_o \alpha_o} B_{\gamma'_o \gamma_o} \left(\frac{E_o + \hbar^2 K_1^2}{2M} \right)$$

$$\langle \varphi_o | V_c | \varphi_o \rangle = -\frac{e^2 4\pi N'_o N_o}{\epsilon \bar{\gamma}_o^2} \left(\frac{2\alpha'_o \alpha_o}{\bar{\alpha}^2} \right)^{1/2} \int_0^\infty e^{q^2 \left(\frac{1}{4\bar{\alpha}^2} - \frac{1}{\bar{\gamma}_o^2} \right)} \left[1 - \phi \left(\frac{q}{2\bar{\alpha}_o} \right) \right] dq$$

Calculando os elementos de matriz para p (m=1):

$$\langle g_1(\gamma'_1) | g_1(\gamma_1) \rangle = B_{\gamma'_1 \gamma_1} = \frac{4\gamma_1^2 \gamma_1'^2}{(\bar{\gamma}_1^2)^2} = (B_{\gamma'_o \gamma_o})^2$$

$$\langle \varphi_{o1} | T_{\rho\phi} | \varphi_{o1} \rangle = \frac{4\hbar^2 (\gamma_1 \gamma_1')^4}{\mu (\bar{\gamma}_1^2)^3} B_{\alpha'_o \alpha_o}$$

$$\langle \varphi_{o1} | H_\rho | \varphi_{o1} \rangle = \frac{4e^2 H^2 (\gamma_1 \gamma_1')^2}{c^2 \mu (\bar{\gamma}_1^2)^3} B_{\alpha'_o \alpha_o}$$

$$\langle \varphi_{o\pm 1} | H_\phi | \varphi_{o\pm 1} \rangle = \pm \frac{\hbar e H}{c\mu} B_{\alpha'_o \alpha_o} B_{\gamma'_1 \gamma_1}$$

$$\langle \varphi_{o1} | V_c | \varphi_{o1} \rangle = -\frac{e^2 (\gamma_1 \gamma_1')^2}{\epsilon (\bar{\gamma}_1^2)^2} \left(\frac{2\alpha'_o \alpha_o}{\bar{\alpha}_o^2} \right)^{1/2} \int_0^\infty e^{q^2 \left(\frac{1}{4\bar{\alpha}_o^2} - \frac{1}{\bar{\gamma}_1^2} \right)} \left[1 - \phi \left(\frac{q}{2\bar{\alpha}_o} \right) \right] \left(1 - \frac{q^2}{\bar{\gamma}_1^2} \right) dq$$

Calculando os elementos de matriz para d (m=2):

$$\langle g_2(\gamma'_2) | g_2(\gamma_2) \rangle = B_{\gamma'_2 \gamma_2} = \left(\frac{2\gamma_2 \gamma_2'}{\bar{\gamma}_2^2} \right)^3 = (B_{\gamma'_o \gamma_o})^3$$

$$\langle \varphi_{o2} | T_{\rho\phi} | \varphi_{o2} \rangle = \frac{12\hbar^2 (\gamma_2 \gamma_2')^5}{\mu (\bar{\gamma}_2^2)^4} B_{\alpha'_o \alpha_o}$$

$$\langle \varphi_{o2} | H_\rho | \varphi_{o2} \rangle = \frac{12e^2 H^2 (\gamma_2 \gamma_2')^3}{c^2 \mu (\bar{\gamma}_2^2)^4} B_{\alpha'_o \alpha_o}$$

$$\langle \varphi_{0\pm 2} | H_\phi | \varphi_{0\pm 2} \rangle = \pm \frac{2\hbar e H}{c\mu} B_{\alpha'_0\alpha_0} B_{\gamma'_2\gamma_2}$$

$$\langle \varphi_{02} | V_c | \varphi_{02} \rangle = -\frac{8e^2}{\epsilon} \frac{(\gamma_2\gamma'_2)^3}{(\bar{\gamma}_2^2)^3} \left(\frac{2\alpha'_0\alpha_0}{\bar{\alpha}_0^2} \right)^{1/2} \cdot \int_0^\infty e^{q^2 \left(\frac{1}{4\bar{\alpha}_0^2} - \frac{1}{\bar{\gamma}_2^2} \right)} (1 - \phi) \left[1 - 2\frac{q^2}{\bar{\gamma}_2^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{q^2}{\bar{\gamma}_2^2} \right)^2 \right] dq$$

Calculando os elementos de matriz para $Z_1(n = 1)$:

$$\langle \chi_1(\alpha'_1) | \chi_1(\alpha_1) \rangle = B_{\alpha'_1\alpha_1} = \left(\frac{2\alpha'_1\alpha_1}{\bar{\alpha}^2} \right)^{3/2}$$

$$\langle \varphi_{10} | T_z | \varphi_{10} \rangle = \frac{\hbar^2 (2\alpha'_1\alpha_1)^{3/2}}{\mu (\bar{\alpha}_1^2)^{5/2}} 3\alpha_1'^2 \alpha_1^2 B_{\gamma'_0\gamma_0}$$

$$\langle \varphi_{10} | V_c | \varphi_{10} \rangle = -\frac{4\sqrt{2}e^2}{\epsilon} \frac{\gamma_0\gamma'_0}{\bar{\gamma}_0^2} \left(\frac{\alpha'_1\alpha_1}{\bar{\alpha}_1^2} \right)^{3/2} \cdot \int_0^\infty \left\{ 1 - \phi \left(\frac{q^2}{2\bar{\alpha}_1} \right) \left(1 + \frac{q^2}{2\bar{\alpha}_1^2} \right) e^{\frac{q^2}{4\bar{\alpha}_1^2}} - \frac{q}{\sqrt{\pi\bar{\alpha}_1}} \right\} e^{-\frac{q^2}{\bar{\gamma}_0^2}} dq$$

$$\langle \varphi_{11} | V_c | \varphi_{11} \rangle = -\frac{4e^2}{\epsilon} \frac{\gamma_1^2\gamma_1'^2}{(\bar{\gamma}_1^2)^2} \left(\frac{2\alpha'_1\alpha_1}{\bar{\alpha}_1^2} \right)^{3/2} \cdot \int_0^\infty \left\{ 1 - \phi \left(\frac{q^2}{2\bar{\alpha}_1} \right) \left(1 + \frac{q^2}{2\bar{\alpha}_1^2} \right) e^{\frac{q^2}{4\bar{\alpha}_1^2}} - \frac{q}{\sqrt{\pi\bar{\alpha}_1}} \right\} e^{-\frac{q^2}{\bar{\gamma}_1^2}} \left(1 - \frac{q^2}{\bar{\gamma}_1^2} \right) dq$$

$$\langle \varphi_{12} | V_c | \varphi_{12} \rangle = -\frac{8e^2}{\epsilon} \frac{\gamma_2^3\gamma_2'^3}{(\bar{\gamma}_2^2)^3} \left(\frac{2\alpha'_1\alpha_1}{\bar{\alpha}_1^2} \right)^{3/2} \cdot \int_0^\infty \left\{ 1 - \phi \left(\frac{q^2}{2\bar{\alpha}_1} \right) \left(1 + \frac{q^2}{2\bar{\alpha}_1^2} \right) e^{\frac{q^2}{4\bar{\alpha}_1^2}} - \frac{q}{\sqrt{\pi\bar{\alpha}_1}} \right\} e^{-\frac{q^2}{\bar{\gamma}_2^2}} \left(1 - 2\frac{q^2}{\bar{\gamma}_2^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{q^2}{\bar{\gamma}_2^2} \right)^2 \right) dq$$

Calculando os elementos de matriz para o termo de mistura:

$$\langle g_0 F | y P_x | g_0 \rangle = 0$$

$$\langle g_{\pm 1} F | y P_x | g_o \rangle = \pm 2 \sqrt{2} \frac{\gamma_1^2 \gamma_o}{\gamma_{1o}^4} \hbar k_l \delta_{ll'}$$

$$\langle g_{\pm 2} F | y P_x | g_o \rangle = \langle g_{\pm 1} F | y P_x | g_{\pm 1} F \rangle = \langle g_{\pm 1} F | y P_x | g_{\mp 1} F \rangle = 0$$

$$\langle g_{\pm 2} | y P_x | g_{\mp 1} \rangle = \mp 4 \frac{\gamma_2^3 \gamma_1^2}{\gamma_{21}^6} \hbar k_l \delta_{ll'}$$

$$\langle g_{\pm 2} | y P_x | g_{\pm 1} \rangle = \langle g_{\pm 2} | y P_x | g_{\pm 2} \rangle = \langle g_{\pm 2} | y P_x | g_{\mp 2} \rangle = 0$$