

Universidade Estadual de Campinas

Propriedades Ópticas de Caixas Quânticas
Semicondutoras

Rodrigo André Caetano

Orientador: Prof. Dr. José Antônio Brum

Dissertação apresentada no Instituto de
Física "Gleb Wataghin" da Unicamp para
a obtenção do título de Mestre em Física.

*Este exemplar corresponde à
rejeição final da dissertação
de Mestrado defendida pelo aluno
Rodrigo André Caetano e aprovada
pela Comissão Julgadora.
04/junho/2003
JAB*



UNICAMP

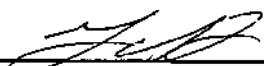
PÓS

Instituto
de Física
Gleb Wataghin

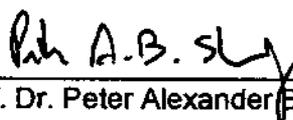
C.P. 6165
CEP: 13083-970
Tel. (19) 788-5305
e-mail: secpos@ifi.unicamp.br

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE **MESTRADO** DE **RODRIGO ANDRÉ CAETANO** – RA 971540 APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 27/02/2003.

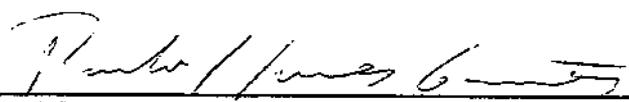
COMISSÃO JULGADORA:



Prof. Dr. José Antonio Brum (Orientador do Candidato) – IFGW/UNICAMP



Prof. Dr. Peter Alexander Bleinroth Schulz – IFGW/UNICAMP



Prof. Dr. Paulo Sérgio Soares Guimarães – DF/UFGM

157023000

Aos meus pais, Armando e Nazareth, e a
minha irmã Larissa, que são a minha vida.

“Eu atravesso as coisas - e no meio da travessia não vejo! - só estava era entretido na idéia dos lugares de saída e de chegada. Assaz o senhor sabe: a gente quer passar um rio a nado, e passa; mais vai dar na outra banda é num ponto muito mais embaixo, bem diverso do primeiro que se pensou. Viver nem não é muito perigoso?”

Riobaldo, ou melhor, Guimarães Rosa

Grande Sertão: Veredas

Agradecimentos

- A meus pais e minha irmã, por amá-los e me saber amado, isso me basta.
- Ao professor Brum, pela amizade paciência e dedicação.
- Aos professores do GPO: Maria, Eliermes, Fernando, Cerdeira e Peter, pelas colaborações e principalmente pela amizade e momentos agradáveis.
- Aos amigos do GPO: Ana, André, Cabelo, Hugo, Luciana, Lene (pelos lanchinhos), Michel, Odilon, Paulo, Luis (hoje morando em Saint Joseph of the Fields) e especialmente ao meu amigo Alexandre que está na Irlanda fazendo seu Doutorado, pelo companherismo e pelas risadas.
- Ao pessoal da sala de alunos do DFMC: Carol, Caetano, Cris, Liliana (obrigado pelas dicas de LaTeX), Fernando e Fred (meninos arretados).
- Aos "Sincrotronianos": Natália, Marina, Marcela, Maya, Harry, Libeca, Flávio, Wladimir e ao grande amigo Félix, por serem mais do que colegas de trabalho.
- Aos amigos André, Celso, Presto, Canígia, Manaus, Pardal, Luciana e Goiano pelas conversas e cafés na cantina.
- Aos "cumpanheiros" do "Num Guenta...Toma Leite": Cássio, Calado, Ricardo, Thiago, Lely e ao Alexandre (sua partida nunca significou sua ausência), por fazerem parte de minha vida.
- Ao time do Santos Futebol Clube, por ter sido Campeão Brasileiro de 2002.
- À FAPESP, pelo apoio financeiro
- E sem demagogia, os meus sinceros agradecimentos aos contribuintes de Estado de São Paulo, pois sem eles, o trabalho não seria possível.

Resumo

Neste trabalho, apresentamos um estudo das propriedades ópticas de Caixas Quânticas (QDs) semicondutoras.

Inicialmente, um sistema de $GaAs/In_{0.24}Ga_{0.76}As/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, intencionalmente dopado com material do tipo-n foi considerado, onde ocorre a transferência de elétrons provenientes da dopagem para o poço quântico de $In_{0.24}Ga_{0.76}As$. Os QDs encontram-se na interface poço/barreira. Apresentamos uma aproximação simples para saber como que a presença QDs influenciam na transferência de cargas. Nossos resultados mostram que a presença dos QDs na amostra não altera significativamente a transferência de cargas e, basicamente, o que ocorre é uma redistribuição dos elétrons que deixam o poço quântico e passam ocupar os estados dos QDs.

Quando excitados opticamente, o QD é ocupado por um par elétron buraco. Em materiais do tipo-II, o elétron e o buraco estão em materiais diferentes mas podem formar um par de partículas ligadas, via interação Coulombiana. Estudamos as excitações ópticas em QDs de $InP/GaAs$, que apresenta alinhamento de banda do tipo-II, no qual o elétron está confinado na região do InP enquanto o buraco se encontra livre na região do $GaAs$. Outro problema abordado foi o problema do éxciton carregado negativamente (X^-). O elétron extra, que pode ser proveniente da dopagem ou de uma excitação óptica acima da barreira, fica confinado na região do InP alterando o espectro óptico da amostra. Nossos resultados mostram que o buraco é ligado em ambos os casos. A recombinação entre complexos do tipo X^- emite fótons mais energéticos do que o fóton emitido na recombinação do éxciton neutro, contribuindo no deslocamento para o azul do espectro de fotoluminescência quando a potência laser é aumentada.

Abstract

In this work, we present a study of the optical properties of semiconductor Quantum Dots (QDs).

First, we consider a system of $GaAs/In_{0.24}Ga_{0.76}As/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ intentionally doped with type-n material, where the electrons are transfer from the doping layer to the $In_{0.24}Ga_{0.76}As$ quantum well. The QDs are in the well/barreir interface. We present a simple approach to know how the presence of the QDs influences the charge transfer. Our results show that the presence of the QDs in the sample does not modify significantly the charge transfer and, basically, what happens is a redistribution of the electrons from the quantumwell to the QDs states.

When optically excited, the QD is occupied by a pair electron-hole. In type-II material, electron and hole are in different layer but they can form a pair of bound particles, due to Coumlombian interaction. We studied the optical excitations in $InP/GaAs$ QD that presents type-II band alignment. The electron is confined in InP region while the hole are free in $GaAs$ region. Other problem investigated concerns the negative charged exciton (X^-). The extra electron can be from the doping or from an optical excitation above the barrier, being confined in the InP region modifying the optical spectrum of the sample. Our results show that the hole is bound in both cases. The recombination of X^- complex emits photons with higher energy than the neutral exciton recombination, contributing to the blue shift of the photoluminescence spectrum with the increasing laser power.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Cálculo do Auto-Estado de um Poço Quântico Dopado	5
2.1	Resultados	9
3	Pontos Quânticos Semicondutores	13
3.1	Cálculo da Energia do QD.	13
3.1.1	Resultados	16
3.2	Influência dos QDs na cálculo autoconsistente	19
4	Estados Excitônicos em Caixas Quânticas Semicondutoras do Tipo-II	24
4.1	Cálculo da função de onda do elétron.	26
4.1.1	Resultados	27
4.2	Cálculo da função de onda do buraco.	29
4.2.1	Resultados	34
4.3	Cálculo do X^-	37
5	Conclusão	44
A	Cálculo do Potencial Causado pelos Doadores Ionizados	46
B	Solução da Equação de Poisson por Integração Direta	49
C	Solução da Equação de Schrödinger pelo Método de Diferenças Finitas	50
D	Relações Geométricas da Caixa Quântica	53

E	Partícula Livre Confinada num Cilíndrico de Paredes de Potencial Infinitas	55
F	Demonstração da Equivalência Entre Minimizar a Energia e Resolver um Problema de Autovalor/Autovetor	59
G	Cálculo dos Elementos de Matriz do Hamiltoniano do QD	62
H	Cálculo do Potencial Devido à Placa que Simula os QDs	69
I	A Equação de Schrödinger Efetiva na Direção de Crescimento para o Elétron em um QD	71
J	Cálculo dos Termos da Equação de Schrödinger do Elétron em um QD	73
K	Solução da Equação de Schrödinger Efetiva do Elétron em um QD	76
L	Cálculo do Potencial Elétrico Sofrido pelo Buraco Devido à Presença do Elétron	81
M	Cálculo das Constantes de Normalização das Funções de Onda Variacionais	83
N	Cálculo do Termo Cinético do Hamiltoniano do Buraco	86
O	Cálculo do Potencial Efetivo Sofrido Pelo Buraco	91
P	Cálculo da Energia de Interação Elétron-Elétron	94

Lista de Figuras

1.1	Esquema do alinhamento de banda de uma heteroestrutura do tipo-II.	3
1.2	Esquema do alinhamento de banda de uma heteroestrutura do tipo-I.	3
1.3	Fotoluminescência da amostra que estudamos.	4
2.1	Perfil da banda de condução na direção de crescimento. E_D é a energia de ligação do doador na barreira. V_{B1} e V_{B2} são, respectivamente, o potencial de confinamento visto pelo elétron no GaAs e no $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, L é a largura do poço e W é a distância entre a interface poço/barreira até o início da região dos doadores ionizados. Também está representado o nível fundamental do poço.	6
2.2	Variação da densidade de carga no poço em função da largura do poço. Inset: Variação da energia em função da largura do poço. . . .	10
2.3	Variação de portadores no poço em função de W	11
2.4	Perfil da banda de condução, em preto, com o sistema em equilíbrio. O nível de energia e o nível de Fermi são mostrados em verde e em azul, respectivamente, a função de onda é mostrada em vermelho. A densidade de elétrons no poço é $7,94 \times 10^{11} cm^{-2}$	12
3.1	Representação da forma do QD. H e ρ_0 são os parâmetros que determinam seu tamanho.	14
3.2	Teste de convergência, usamos 17 elementos do tipo $\phi_{nm}(\rho, \varphi)$ e variamos o número de elementos $\chi_p(z)$. A energia converge se usamos 40 elementos do tipo $\chi_p(z)$	18
3.3	Teste de convergência, usamos 40 elementos do tipo $\chi_p(z)$ e variamos o número de elementos $\phi_{nm}(\rho, \varphi)$. A energia converge se usamos 17 elementos do tipo $\phi_{nm}(\rho, \varphi)$	19

3.4	Energia dos estados do QD na presença de um gás bidimensional de elétrons em função do momento angular; em vermelho é mostrado o nível do estado fundamental do poço e em verde o nível de Fermi.	20
3.5	Probabilidade integrada da função de onda do elétron no QD em função de ρ . Em preto, temos o estado fundamental; em vermelho temos o primeiro estado excitado para $m = 0$ e em verde temos o estado menos energético para $m = 1$	21
3.6	Probabilidade integrada da função de onda em função de z . Em preto temos o estado fundamental, em vermelho o o primeiro estado excitado para $m = 0$ e em verde, o estado menos energético para $m = 1$. Também são indicados o z médio dos estados confinados no QD e a região dos doadores ionizados.	22
3.7	Comportamento da densidade de elétrons no poço em função da variação da densidade de QDs na amostra (em preto). Total dos elétrons (QDs+poço) em vermelho	23
3.8	Energia do estado fundamental do poço em função da densidade de QD (em preto), também é mostrado a nível de Fermi (vermelho).	23
4.1	Alinhamento de banda em uma amostra do tipo-II, o entortamento da banda de valência representa o efeito do potencial Coulombiano. Elétrons e buracos estão em materiais diferentes. Em vermelho, representamos a função de onda do elétron e em azul a função de onda do buraco.	25
4.2	Comportamento da energia em função de λ	28
4.3	Comportamento de P_ρ em função de ρ . Em preto, P_ρ calcula do pelo método variacional e em vermelho calculado pelo método do cilindro.	29
4.4	Comportamento de P_z em função de z . Em preto, P_z calculado pelo mé todo variacional e em vermelho pelo método do cilindro.	30
4.5	Corte do potencial efetivo sentido pelo buraco em $z_h = \frac{L}{2}$. Note que esse é o potencial do buraco e não o potencial do elétron (que tem sinal oposto ao potencial de buraco), portanto, um mínimo absoluto de energia é encontrado em $\rho = 0$	31

4.6	Corte do potencial efetivo sentido pelo buraco em $\rho_h = 0$. Aqui, novamente mostramos o potencial de buraco, que é diferente do potencial de elétron. Dois mínimos são encontrados próximos à interface <i>InP/GaAs</i>	32
4.7	Comportamento da energia em função de λ_1	35
4.8	Variação da energia em função de λ_2	36
4.9	Variação da energia em função de λ_3	36
4.10	Variação da energia em função de λ_4	37
4.11	Variação da probabilidade integrada em função de ρ_h	38
4.12	Probabilidade integrada em função de z_h . Também são representadas as regiões do poço quântico (em verde) e do QD (em vermelho) . . .	38
4.13	Densidade de probabilidade integrada em função de ρ_h	41
4.14	Densidade de probabilidade integrada em função de z_h . Em verde representamos o poço quântico e em vermelho o QD.	42
D.1	Esfera cortada por um plano	53

Capítulo 1

Introdução

Caixas Quânticas (QDs) começaram a ser estudadas durante a década de 80 devido ao progresso tecnológico, especialmente nas técnicas de litografia que permitiram o desenvolvimento de estruturas de estado sólido que confinam os portadores em três dimensões. Em 1986, Reed et. al. [1] relataram a criação de QDs quadrados com dimensões laterais da ordem de 250 nm. Ainda em 1986, outros centros de pesquisa, como a AT&T Bell Laboratories [2] e a Bell Communication Research Incorporated [3], também reportaram a fabricação de QDs.

Além de litografia, outras técnicas foram desenvolvidas para confinar portadores de cargas em três dimensões, um breve relato de algumas dessas técnicas pode ser encontrado em [4].

Os QDs de nosso interesse são os auto-formados, que crescem espontaneamente na interface de um poço quântico. Em 1993, Leonard et.al. [5], mostraram uma técnica de se obter QDs com dimensões relativamente uniformes, explorando a diferença do parâmetro de rede dos materiais usados para o crescimento de um sistema bidimensional. A diferença do parâmetro de rede faz com que haja uma tensão local, favorecendo a formação de ilhas do material de gap menor e, dessa forma, criando um potencial de confinamento 3D. No trabalho de Leonard, os QDs auto-formados tinham, em média, um diâmetro de 300Å e uma dispersão de 10% em torno de desse valor médio. Durante esses 10 anos, conseguiu-se um grande avanço quanto à uniformidade das dimensões dos QDs. Alchalabi et. al. [6], recentemente relataram a auto formação de QDs de PbSe em um substrato de PbTe que apresentam uma dispersão em torno de 2%.

O interesse nos QDs está tanto na perspectiva de sua utilização para fabricação de novos dispositivos optoeletrônicos quanto no interesse em Física fundamental.

Com relação às aplicações tecnológicas, os QDs podem ser a base para a nova geração de laser[7]. Também tem se discutido a possibilidade de sua utilização para dispositivos de memória ópticas[8].

Em relação aos aspectos fundamentais dos QDs, destaca-se o acoplamento entre os níveis do QD e um sistema bidimensional. Uma situação como essa é obtida através de uma caixa quântica com poucos níveis eletrônicos, os quais, quando a amostra é dopada, podem estar ocupados.

Ribeiro et. al. [9] e Nakaema et. al. [10] estudaram uma amostra com essas características. Nos experimentos foram estudados espectros de reflectância e transmissão fotomodulada, além de foto e microfotoluminescência de QDs na presença de um gás bidimensional de elétrons. A dependência das propriedades ópticas das caixas quânticas com relação às propriedades do gás de elétrons nos levou a estudar teoricamente a influência que a presença dos QDs causa na formação do gás de elétrons.

Outro aspecto fundamental de grande interesse nos QDs é o deslocamento para o azul do pico da fotoluminescência enquanto se aumenta a potência do laser, em QDs do tipo-II. As heteroestruturas do tipo-II são aquelas nas quais elétrons e buracos se localizam em materiais diferentes devido a estrutura de banda da amostra. A (Fig 1.1) mostra o diagrama de banda de uma amostra do tipo-II. No caso da ilustração, o elétron fotoexcitado se localiza na região no *InP* enquanto o buraco está na região do *GaAs*.

Outro tipo de heteroestrutura são as do tipo-I. Nesse tipo de amostra, tanto o elétron quanto o buraco ocupam a mesma região da amostra. A (Fig 1.2) representa o diagrama de banda de uma amostra do tipo-I. No caso da ilustração, tanto elétrons quanto buracos são localizados na região do *GaAs*.

O tempo de vida de recombinação radioativa em amostras do tipo-II é muito maior que em materiais do tipo-I, devido à recombinação espacialmente indireta. Essa característica pode fazer dos QDs do tipo-II atrativos para a fabricação de dispositivos, como os de memória óptica.

Nakaema et. al.[11] estudaram uma amostra de *InP/GaAs* que apresenta alin-

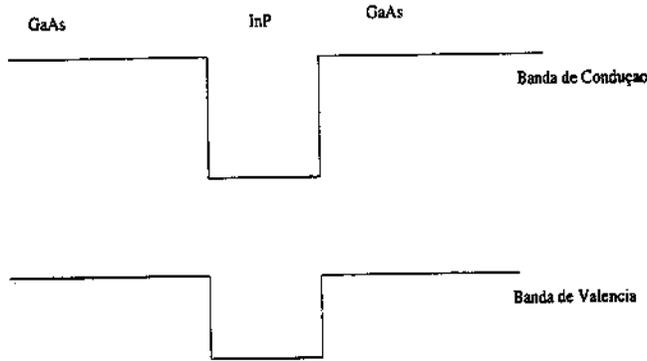


Figura 1.1: Esquema do alinhamento de banda de uma heteroestrutura do tipo-II.

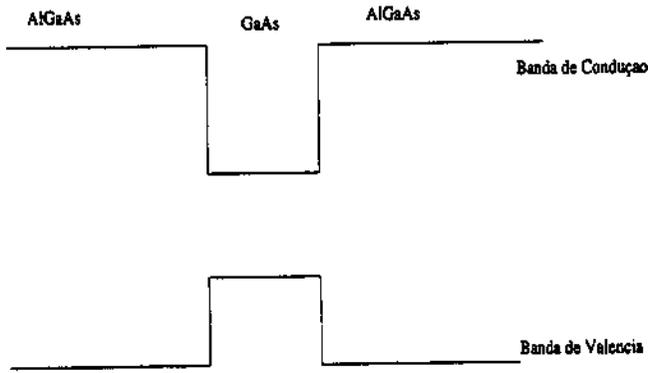


Figura 1.2: Esquema do alinhamento de banda de uma heteroestrutura do tipo-I.

hamento de banda do tipo-II, em que os elétrons são localizados no *InP* e o buracos está na região do *GaAs*. No trabalho de Nakaema, enquanto se aumenta em quatro ordens de grandeza a intensidade do laser, o pico da fotoluminescência é deslocado em cerca de 70 meV para o azul (Fig 1.3)

Uma das hipóteses dos autores é que o desvio para o azul possa ser originado pela recombinação não apenas de complexos excitônicos, mas também de bi-éxcitons e de tríons, que são complexos excitônicos com cargas extras.

Nesta dissertação, vamos estudar a possibilidade, nas amostras experimentalmente estudadas, do estado excitônico formar um estado ligado, ou seja, se o buraco, que está delocalizado na região do *GaAs*, fica confinado pela interação Coulombiana com o elétron. Também determinaremos a energia do fóton liberado na recombinação.

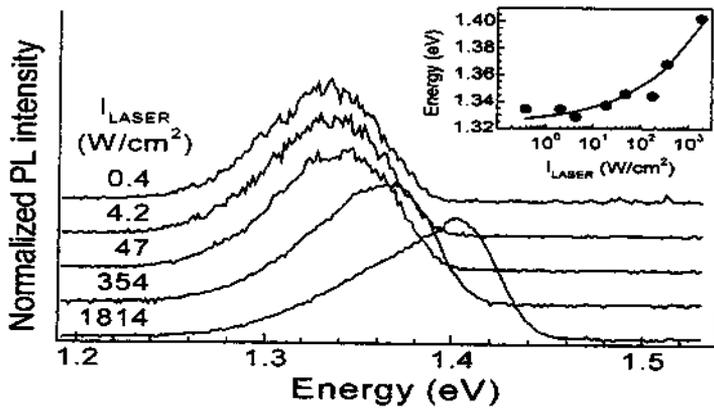


Figura 1.3: Fotoluminescência da amostra que estudamos.

Quando a amostra é dopada, ou quando são criados portadores por excitações ópticas acima da barreira, como no caso do experimento, pode-se ter excesso de portadores de carga na amostra. Dessa forma, quando ocorrer uma excitação óptica, podemos, além do par elétron-buraco, ter cargas extras interagindo com o par. A situação mais simples em que há excesso de cargas é aquela em que um elétron confinado no QD interage com um par elétron-buraco, formando um complexo de três partículas é chamado de tríon X^- . Faremos um estudo desse complexo e determinaremos a energia do fóton emitido na recombinação do elétron com o buraco, na presença da carga extra. Estudaremos a diferença de energia entre esse fóton e o fóton liberado na recombinação em que não há excesso de carga, com o objetivo de estimar a influência no deslocamento para o azul da fotoluminescência.

No capítulo 2 dessa dissertação, apresentamos um cálculo autoconsistente da transferência de cargas, proveniente da dopagem, para o poço quântico.

No capítulo 3, consideramos os QDs na presença de um gás bidimensional de elétrons e a influência que a presença dos QDs apresentam na transferência de cargas, da dopagem para o poço.

No quarto capítulo, investigamos os estados excitônicos em QDs do tipo-II. Também levamos em conta a presença de um elétron extra confinado no QD.

Finalmente, no quinto capítulo, apresentamos as conclusões gerais de nosso trabalho.

Capítulo 2

Cálculo do Auto-Estado de um Poço Quântico Dopado

Nesse capítulo vamos apresentar o cálculo do auto-estado de um sistema de $GaAs/In_{0.24}Ga_{0.76}As/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ com dopagem modulado do tipo-n (utilizando como caso exemplo o Si). Os trabalhos apresentados nessa dissertação utilizam a aproximação da massa efetiva e da função envelope. No plano xy assumimos a dispersão parabólica de energia. Essas aproximações têm sido exaustivamente testadas nos materiais que estamos interessados[12], nos garantido segurança necessária para realização de nossas pesquisas.

Em poços quânticos dopados, a formação de um gás bidimensional de elétrons ocorre porque o estado dos doadores na barreira possui um nível de energia maior do que o nível de energia do poço. Isso faz com que os elétrons livres provenientes da dopagem tunelem da barreira para o poço, separando as cargas (Fig 2.1).

A presença de elétrons livres e de cargas positivas localizadas cria um potencial eletrostático que deve ser levado em conta no cálculo do auto-estado do poço. Então, a determinação de auto-estado ocorre através da solução da seguinte equação de Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_{B1}Y \left[-z + \frac{L}{2} \right] + V_{B2}Y \left[z + \frac{L}{2} \right] - e\Phi_{sc}(z) \right] \psi(z) = E\psi(z) \quad (2.1)$$

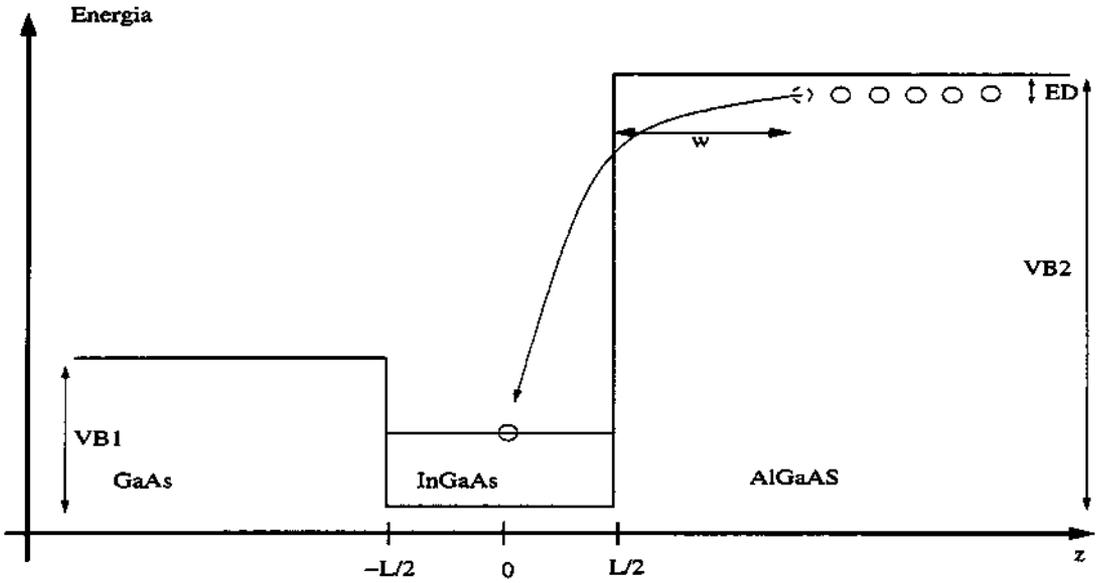


Figura 2.1: Perfil da banda de condução na direção de crescimento. E_D é a energia de ligação do doador na barreira. V_{B1} e V_{B2} são, respectivamente, o potencial de confinamento visto pelo elétron no GaAs e no $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, L é a largura do poço e W é a distância entre a interface poço/barreira até o início da região dos doadores ionizados. Também está representado o nível fundamental do poço.

onde m^* é a massa efetiva, considerada a mesma em toda a amostra; V_{B1} e V_{B2} são, respectivamente, o potencial de confinamento visto pelo elétron na banda de condução no $GaAs$ e no $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, obtidos através da descontinuidade da banda de condução dos dois materiais envolvidos; $Y(x)$ é a função degrau; e é a carga do elétron, tomada como positiva e $\Phi_{sc}(z)$ é o potencial eletrostático, devido à interação entre elétrons livres e cargas positivas localizadas, que, calculado na aproximação de Hartree, é obtido pela solução da seguinte equação de Poisson:

$$\frac{d^2\Phi_{sc}(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e}{\kappa} (\rho_e(z) - \rho_d(z)) \quad (2.2)$$

onde κ é a constante dielétrica, que foi considerada a mesma em toda a amostra, $\rho_e(z)$ e $\rho_d(z)$ são, respectivamente, a densidade volumétrica de elétrons no poço e a densidade volumétrica de doadores ionizados na barreira.

Nessa aproximação, substituímos o potencial de interação elétron-elétron, que é um problema de muitos corpos, por um potencial médio. Assim, na aproximação

de Hartree, considerando apenas um nível do poço ocupado e assumindo a dopagem homogênea, temos :

$$\frac{d^2\Phi_{sc}(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e}{\kappa} (N_e|\psi(z)|^2 - \rho_d(z)) \quad (2.3)$$

em que N_e é a densidade superficial de elétrons no poço.

$\Phi_{sc}(z)$ pode ser separado em duas partes, uma, que chamaremos de $\Phi_e(z)$, que é a parte do potencial devido aos elétrons livres, outra, que chamaremos de $\Phi_d(z)$, é a parte devido aos doadores ionizados. Assim, $\Phi_{sc}(z)$ pode ser escrito da seguinte forma: $\Phi_{sc}(z) = \Phi_e(z) + \Phi_d(z)$, onde $\Phi_e(z)$ e $\Phi_d(z)$ são dados pelas seguintes expressões.

$$\frac{d^2\Phi_e(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e}{\kappa} N_e|\psi(z)|^2 \quad (2.4)$$

$$\frac{d^2\Phi_d(z)}{dz^2} = -\frac{4\pi e}{\kappa} \rho_d(z) \quad (2.5)$$

Consideramos uma dopagem assimétrica, apenas no *AlGaAs*. A dopagem está presente a partir de uma distância W da interface *InGaAs/AlGaAs*, a qual chamamos espaçador. Estamos considerando $T = 0K$. Para atingir o equilíbrio termodinâmico, uma parte dos doadores é ionizada. Chamamos essa região de comprimento de depleção, L_D . A distribuição de cargas positiva, ou de doadores ionizados, se escreve como:

$$\rho_d(z) = e \begin{cases} N_d & \text{se } \frac{L}{2} + W < z < \frac{L}{2} + L_D + W \\ 0 & \text{se } \frac{L}{2} + W > z > \frac{L}{2} + W + L_D \end{cases} \quad (2.6)$$

onde N_d é a densidade volumétrica de doadores que, intencionalmente e de forma controlada, foi inserido na barreira, sendo, portanto, uma grandeza conhecida.

A equação (2.5) pode ser resolvida analiticamente (ver apêndice A) e $\Phi_d(z)$ se escreve:

$$\Phi_d(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } z < \bar{z} \\ -\frac{2\pi e}{\kappa} (z - \bar{z})^2 & \text{se } \bar{z} < z < \tilde{z} \\ -\frac{2\pi e}{\kappa} N_d L_D (2z + L_D - \tilde{z}) & \text{se } z > \tilde{z} \end{cases} \quad (2.7)$$

onde $\bar{z} = \frac{L}{2} + W$ e $\tilde{z} = \frac{L}{2} + W + L_D$.

A parte do potencial referente aos elétrons é dada por integração dupla da equação (2.4), que é equivalente a integrar diretamente a seguinte equação (ver apêndice B):

$$\Phi_e(z) = \frac{4\pi e}{\kappa} N_e \left[z \int_{-\infty}^{z'} dz' |\psi(z)|^2 - \int_{-\infty}^{z'} dz' |\psi(z)|^2 z' \right] \quad (2.8)$$

Para resolvermos o problema, ou seja, resolver a equação (2.1) e, dessa forma, determinarmos a função de onda, precisamos calcular $\Phi_e(z)$ que é dado pela equação (2.8) e necessita do prévio conhecimento da função de onda. Assim, temos que resolver as duas equações acopladas de forma auto-consistente.

Esse conjunto de duas equações acopladas está sujeito às seguintes condições de contorno:

i) Equilíbrio elétrico \Rightarrow A somatória total de cargas deve ser zero, ou seja, todo elétron livre no poço deixou um doador ionizado na barreira.

ii) Equilíbrio termodinâmico \Rightarrow O nível de Fermi, ou o potencial químico, deve ser o mesmo em toda a amostra.

O equilíbrio elétrico é naturalmente satisfeito se escrevemos: $N_e = L_D N_d$, isto é, forçamos que o comprimento de depleção seja tal que não haja excesso de carga. Já o equilíbrio termodinâmico é satisfeito fazendo com que o nível de Fermi calculado na barreira seja igual ao nível de Fermi no poço.

O nível de Fermi na barreira é o nível de energia dos elétrons dos doadores não ionizados (pois são os elétrons mais energéticos) que pode ser escrito como:

$$E_F^b = V_{B2}(z \rightarrow \infty) - E_D \quad (2.9)$$

onde E_F^b é o nível de Fermi na barreira e E_D é a energia de ligação do doador na barreira.

Para o poço, o nível de Fermi é obtido pela energia do elétron transferido mais energético. A $T = 0K$ temos [12]:

$$N_e = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_F^p - E) Y(E_F^p - E) \quad (2.10)$$

onde E é a energia do estado fundamental (único ocupado) e E_F^p é o nível de Fermi no poço. Como N_e é conhecido, a equação (2.10) determina E_F^p .

Resolvemos o conjunto das duas equações acopladas da seguinte maneira:

Primeiro calculamos, pelo método de **diferenças finitas**(ver apêndice C), a equação (2.1) para o poço não dopado ($\Phi_{sc}(z) = 0$). A seguir, transferimos elétrons para o poço, ou seja, colocamos uma densidade N_e de elétrons no poço e, através das equações (2.7) e (2.8) calculamos $\Phi_{sc}(z)$ usando a função de onda calculada anteriormente. Voltamos à equação (2.1) e recalculamos a função de onda, mas agora levando em conta o potencial eletrostático. Repetimos esse procedimento até a convergência da energia. Em média, são necessário 4 ciclos para que ocorra a convergência do estado fundamental ($\frac{E_{i+1}-E_i}{E_{i+1}} < 10^{-3}$), onde E_i é energia do estado fundamental calculado no i -ésimo ciclo.

Note que o problema ainda não está resolvido pois ainda não asseguramos o equilíbrio termodinâmico. Para fazer isso, calculamos, usando a equação (2.10) o nível de Fermi no poço e comparamos com o nível de Fermi da barreira, calculado via equação (2.9). Se o nível de Fermi do poço for menor do que o da barreira, significa que poucos elétrons foram transferidos para o poço, então repetimos o procedimento anterior usando um N_e maior do que o usado anteriormente; se o nível de Fermi do poço for maior do que o da barreira, significa que foram transferidos muitos elétrons e devemos repetir o procedimento anterior usando um N_e menor do que o usado anteriormente. Na prática, são necessários, em média, dezessete ciclos para se obter a igualdade do nível de Fermi ($\frac{E_F^p - E_F^b}{E_F^b} < 10^{-3}$) e com isso temos a solução autoconsistente do problema.

2.1 Resultados

Como estamos trabalhando em um sistema de $GaAs/In_{0.24}Ga_{0.76}As/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, vamos usar os seguintes valores para os parâmetros: $E_D = 10meV$ [9], $m^* = 0.067m_0$ [13], onde m_0 é a massa de repouso do elétron e $\kappa = 13.2$ [9]. V_{B1} e V_{B2} são, respectivamente, 208[14] e 433 meV[12]. A densidade de doadores introduzidos na amostra, N_d , é $5 \times 10^{19}cm^{-3}$.

O primeiro cálculo que fizemos foi o da quantidade de carga que é transferida em função da largura do poço. A (Fig 2.2) nos mostra o resultado desse cálculo para uma amostra com $W=300 \text{ \AA}$. Vemos que a partir de uma determinada largura de poço a densidade é dominada pelo potencial eletrostático e os fatores estruturais da amostra influenciam muito pouco. Esse fato é refletido na energia do estado

fundamental, que também se estabiliza a partir de uma dada largura de poço (inset da (Fig 2.2)). Isso acontece porque a presença de doadores ionizados na barreira faz com que a função de onda não seja mais igualmente distribuída em todo poço, como é o caso do poço não dopado, mas tenda a se localizar nas proximidades da interface poço/barreira, no lado em que foram inseridos os doadores. Em outras palavras, os elétrons que estão no poço são atraídos pelos doadores ionizados da barreira. Em poços estreitos, mesmo com essa tendência da função de onda, em todo o poço a função de onda apresenta valores significativos, porém, com o aumento da largura do poço a função de onda fica praticamente toda localizada para a interface onde foi introduzida a dopagem, e não se altera com o aumento da dimensão do poço. Na prática, recuperamos a situação de uma heterojunção simples.

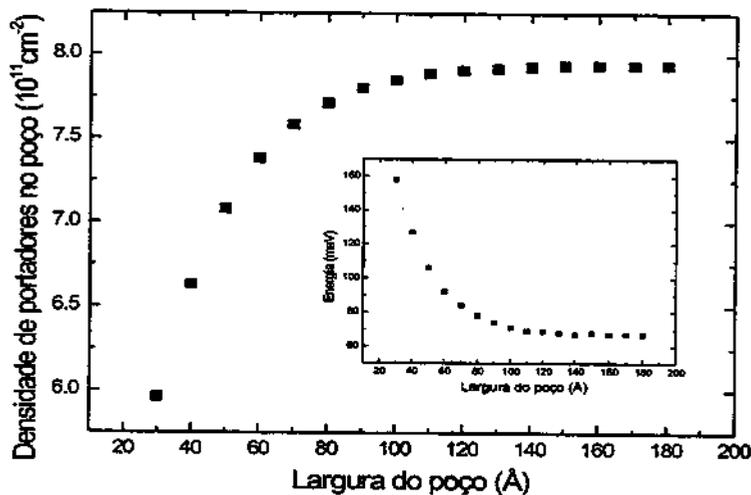


Figura 2.2: Variação da densidade de carga no poço em função da largura do poço. Inset: Variação da energia em função da largura do poço.

Ainda com o objetivo de estudar a transferência de carga, fizemos o estudo da variação da densidade de carga transferida em função de W em um poço de 150 \AA . O gráfico da (Fig 2.3) nos mostra uma clara diminuição da densidade de carga no poço com o aumento de W .

Em uma análise simplificada, podemos explicar o resultado da (Fig 2.3) compara-

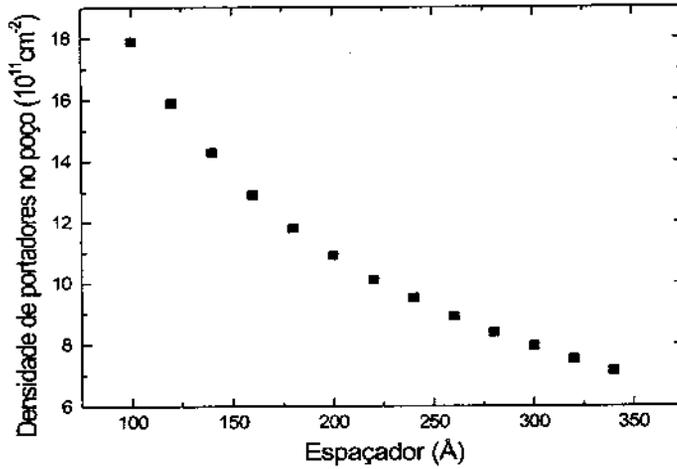


Figura 2.3: Variação de portadores no poço em função de W .

ndo nosso sistema com um capacitor de placas paralelas. Para atingir o equilíbrio termodinâmico, o nível de Fermi deve ser igual em toda a amostra, para isso, deve-se aumentar o potencial em $\Delta\phi = E_F^b - E$. Parte do potencial é aumentado devido à interação eletrostática e parte devido ao preenchimento do espaço de fase. A parte devida ao potencial elétrico, no caso do capacitor, é escrita como: $\Delta\phi_{ele} = \frac{eN_d \cdot L_D \cdot W}{2\kappa} = \frac{eN_d W}{2\kappa}$ e parte devida ao preenchimento do espaço de fase é dada pela equação (2.10): $\Delta\phi_{pre} = \frac{N_e \hbar^2 \pi}{m^*}$.

Dessa forma, temos que:

$$\Delta\phi = N_e \left[\frac{eW}{2\kappa} + \frac{\hbar^2 \pi}{m^*} \right] \Rightarrow N_e = \frac{\Delta\phi}{\left[\frac{eW}{2\kappa} + \frac{\hbar^2 \pi}{m^*} \right]} \quad (2.11)$$

Como $\Delta\phi$ é constante com relação à W , temos que diminuir N_e com o aumento de W , ou melhor, quanto maior a distância W , maior é a energia eletrostática criada pelas cargas.

A interação entre os portadores livres e os doadores ionizados alteram o perfil da banda de condução. A (Fig 2.4) nos mostra como fica este perfil para um poço de 150 Å e com espaçador de 300 Å.

A energia do estado fundamental do poço dopado é 67,78 meV, enquanto do

não dopado é 18,77 meV, sempre tomando como zero de energia o ponto de menor energia da banda de condução.

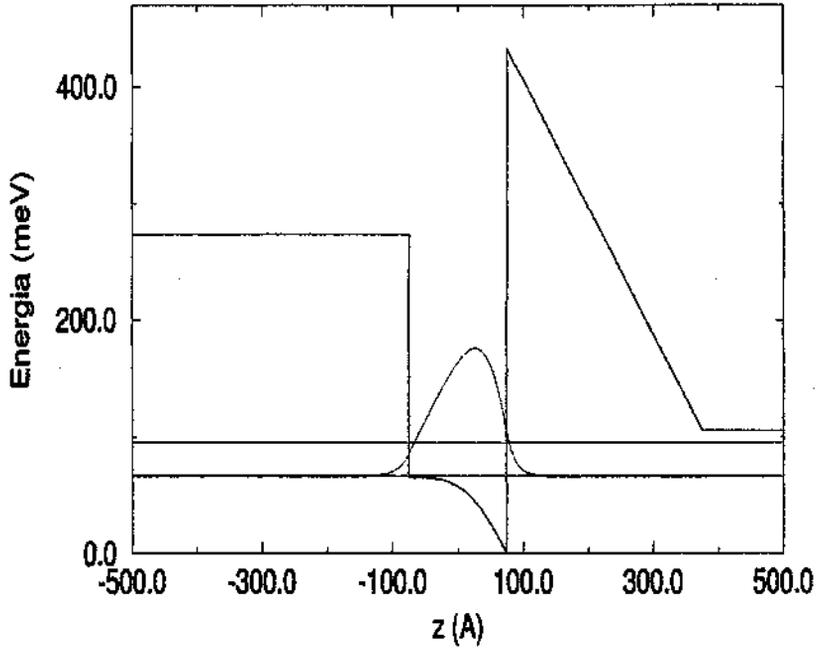


Figura 2.4: Perfil da banda de condução, em preto, com o sistema em equilíbrio. O nível de energia e o nível de Fermi são mostrados em verde e em azul, respectivamente, a função de onda é mostrada em vermelho. A densidade de elétrons no poço é $7,94 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$.

Ratificando o que dissemos anteriormente, note a assimetria da função de onda. A parte não nula da função de onda está deslocada para o lado da barreira onde a dopagem foi inserida. Podemos ver isso de outra forma: o entortamento da banda cria um potencial confinador no lado do poço mais próximo da dopagem fazendo com que os elétrons fiquem confinados na lateral do poço.

Com isso, resolvemos a primeira parte do problema, na aproximação de Hartree, determinando o auto-estado fundamental de energia do poço quântico moduladamente dopado.

Capítulo 3

Pontos Quânticos Semicondutores

Nesse capítulo vamos estudar os pontos quânticos, ou “quantum dots” (QDs) auto formados e sua inserção em uma amostra dopada modularmente. Essas estruturas podem ser formadas durante o processo de crescimento dos poços quânticos em determinadas condições. Pode-se, a partir do controle dos parâmetros de crescimento, controlar a forma e as dimensões dos QDs. A amostra que estamos interessados apresenta QDs com o formato aproximado de uma calota esférica, de modo que podemos aproximar o potencial do QD pelo potencial mostrado na (Fig 3.1).

O primeiro objetivo desse capítulo, é calcular os níveis de energia dos QDs sob influência de um gás bidimensional de elétrons. Depois, vamos estudar a influência que os QDs causam na transferência de elétrons para o poço quântico.

3.1 Cálculo da Energia do QD.

O Hamiltoniano do sistema é dado por:

$$H_{dot} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{B1} Y\left(\frac{L}{2} - z\right) + V_{B2} Y\left(-\frac{L}{2} + z\right) - V_{B2} Y\left(r_0^2 - \rho^2 - (z - z_0)^2\right) Y\left(z - \frac{L}{2}\right) + V_{wl}(z) Y\left(\frac{L^2}{4} - z^2\right) - e\Phi_{sc}(z) \quad (3.1)$$

onde os dois primeiros termos do potencial referem-se ao potencial das barreiras, determinando o poço de potencial, também chamado de camada molhada (wetting

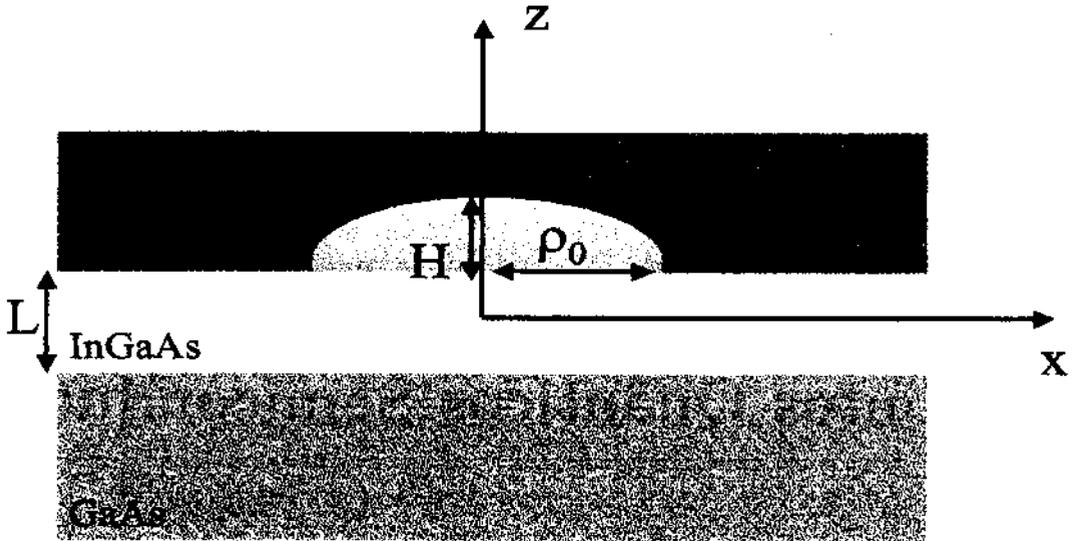


Figura 3.1: Representação da forma do QD. H e ρ_0 são os parâmetros que determinam seu tamanho.

layer), o terceiro termo de potencial representa o potencial da caixa e $\Phi_{sc}(z)$ é o termo do potencial do gás de elétrons que foi calculado no capítulo anterior; r_0 e z_0 são parâmetros que caracterizam o QD e são dados pelas expressões (ver apêndice D):

$$r_0 = \frac{1}{2h} (\rho_0^2 + H^2) \quad (3.2)$$

$$z_0 = H + \frac{L}{2} - r_0 \quad (3.3)$$

Um fenômeno chamado difusão de In ocorre nestes sistemas. Esse fenômeno faz com que haja um gradiente na concentração de In ao longo da direção de crescimento. Empiricamente, nota-se que nos QDs a concentração de In é maior do que no poço quântico, como o gap depende da concentração de In e, desse modo, os potenciais de barreira também dependem, temos que corrigir os potenciais de barreira de acordo com a concentração; $V_{wi}(z)$ é a função que faz essa correção. Nessa dissertação, vamos considerar que a concentração de In no poço é aproximadamente constante e em torno de 25%, que é um valor controlado experimentalmente. No QD,

embora a concentração de In no interior dos QDs seja um valor pouco conhecido, estima-se um valor em torno de 60% [15], o que nos dá $V_{wt} = 337$ meV.

O método que adotamos para resolver (3.1) é projetar o Hamiltoniano em uma base conveniente. Notando a simetria cilíndrica do potencial, a base que escolhemos para projetar as soluções de (3.1) são os auto-estados de uma partícula livre confinada num cilindro de paredes de potencial infinito, com altura D e raio R , muito maiores que a dimensão do sistema. Mais explicitamente, a base que usaremos para projetar (3.1) são os auto-estados do seguinte Hamiltoniano:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_\infty(x, y, z) \quad (3.4)$$

onde $V_\infty(x, y, z)$ é o potencial do cilindro, dado por:

$$V_\infty(x, y, z) = V_\infty Y\left(z^2 - \frac{L}{2}\right) Y(x^2 + y^2 - R^2) \quad (3.5)$$

em que $V_\infty \rightarrow \infty$

A solução da equação (3.5) é exata e é dada por (ver apêndice E):

$$\psi_{p,n,m}(x, y, z) = \phi_{n,m}(\rho, \varphi) \chi_p(z) \quad (3.6)$$

onde:

$$\chi_p(z) = \begin{cases} \cos\left(\frac{p\pi z}{D}\right) & \text{se } p = 0, 2, 4, \dots \\ \sin\left(\frac{p\pi z}{D}\right) & \text{se } p = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (3.7)$$

$$\phi_{nm}(\rho, \varphi) = \frac{N_{nm}}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm im\varphi} J_m(\alpha_{nm}\rho) \quad (3.8)$$

onde J_m é a função de Bessel do primeiro tipo e de ordem m ; N_{nm} é a constante de normalização dada por:

$$N_{nm} = \frac{\sqrt{2}}{R} \frac{1}{|J_{m+1}(\alpha_{nm}R)|} \quad (3.9)$$

A energia associada à direção z e ao plano xy são dadas, respectivamente pelas seguintes expressões:

$$E_z = \begin{cases} \frac{\hbar^2 \pi^2 (p+1)^2}{D^2 2m^*} & \text{se } p = 0, 2, 4, \dots \\ \frac{\hbar^2 \pi^2 p^2}{D^2 2m^*} & \text{se } p = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (3.10)$$

$$E_{xy} = \frac{(\alpha_{nm}\hbar)^2}{2m^*} \quad (3.11)$$

onde $\alpha_{nm}R = a_{nm}$ e a_{nm} é o $n^{\text{ésimo}}$ zero na função de Bessel do primeiro tipo de ordem m .

A solução geral da equação (3.1) é escrita como combinação linear das soluções de H_0 :

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \sum_{p,n,m} A_{p,n,m} \psi_{p,n,m}(\rho, \varphi, z) \quad (3.12)$$

Resolver esse problema, isto é, achar $A_{p,n,m}$ que minimizem a energia é equivalente a resolver o seguinte problema de auto-valor/auto-vetor (ver apêndice F):

$$\langle \psi_{p,n,m} | H_{dot} | \psi_{p,n,m} \rangle \cdot \vec{A} = E \cdot \vec{A} \quad (3.13)$$

Esses elementos dessa matriz estão calculados no apêndice G.

Com esse procedimento, no lugar de termos que resolver uma equação diferencial de segunda ordem (em três coordenadas), temos apenas que diagonalizar uma matriz. Para a diagonalização novamente optamos por usar a subrotina EVESF da IMSL por nos permitir calcular apenas os menores auto-valores e seus respectivos auto-vetores.

Como H_{dot} (equação 3.1) não depende da coordenada angular φ e o operador momento angular na direção z é dado por: $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$, temos que: $[H_{dot}, L_z] = 0$, ou seja, H_{dot} comuta com o operador momento angular. Isso quer dizer que os auto-estados de H_{dot} também são auto-estados de L_z , com auto-valor $m\hbar$. O fato de m ser um bom número quântico é uma assinatura da simetria cilíndrica e isso é refletido no fato de que em todos os elementos de matriz (ver apêndice G) ter o termo δ_{mm} , isto é, não há mistura de orbitais com diferentes momentos angulares. Na solução (3.12), portanto, a somatória limita-se apenas aos índices p e n , com m fixo indexando a solução.

3.1.1 Resultados

Os parâmetros do QD são os seguintes: $H=44 \text{ \AA}$; $\rho_0 = 180 \text{ \AA}$. O poço é o mesmo do capítulo anterior; $R = 1000 \text{ \AA}$, $D = 1000 \text{ \AA}$. Na (Fig 3.2) mostramos o gráfico da energia do estado fundamental em função do número de elementos de base do tipo

$\chi_p(z)$ usando 17 elementos do tipo $\phi_{nm}(\rho, \varphi)$. Na (Fig 3.3) fizemos o mesmo tipo de gráfico, mas dessa vez usando 40 elementos do tipo $\chi_p(z)$ e variando o número de elementos do tipo $\phi_{nm}(\rho, \varphi)$.

Desse resultado, concluímos que uma base com 17 elementos do tipo $\phi_{nm}(\rho, \varphi)$ e 40 elementos do tipo $\chi_p(z)$ é suficiente para obtermos uma boa convergência para o estado fundamental.

Como já discutimos, m é um bom número quântico, vamos representar na (Fig 3.4) a energia dos primeiros estados em função do momento angular.

Podemos, em analogia à Física Atômica, dizer que os estados com $m = 0$ são os estados do tipo s; os estados com $m = 1$ são os estados do tipo p e assim por diante. Os estados do tipo s, têm degenerescência 2 por conta do spin; já os outros estados (p,d,f...) têm degenerescência 4, por conta do spin e da simetria do momento angular ($E_{n,m} = E_{n,-m}$).

Os níveis de energia abaixo da energia do estado fundamental do poço estão confinados no QD, enquanto os estados com energia maior são, na verdade, estados do poço modulados pela caixa. A discretização ocorre por causa do confinamento do espaço pelo cilindro de paredes de potencial infinito que fizemos pra projetar as soluções de(3.1).

O conceito de probabilidade integrada nos é útil para a visualização de funções de onda 3D. Definimos as seguintes probabilidades integradas:

$$P_\rho(\rho) = \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-\frac{D}{2}}^{\frac{D}{2}} dz |\psi(z, \rho)|^2 \quad (3.14)$$

$$P_z(z) = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^R d\rho |\psi(z, \rho)|^2 \quad (3.15)$$

$P_\rho(\rho)$ pode ser fisicamente interpretado como a probabilidade de se encontrar um elétron em um certo ρ em qualquer φ e qualquer z , enquanto $P_z(z)$ é interpretado como a probabilidade de encontrar um elétron em um certo z em qualquer ρ e qualquer φ .

A (Fig 3.5) mostra o comportamento de $P_\rho(\rho)$ em função de ρ para os primeiros estados.

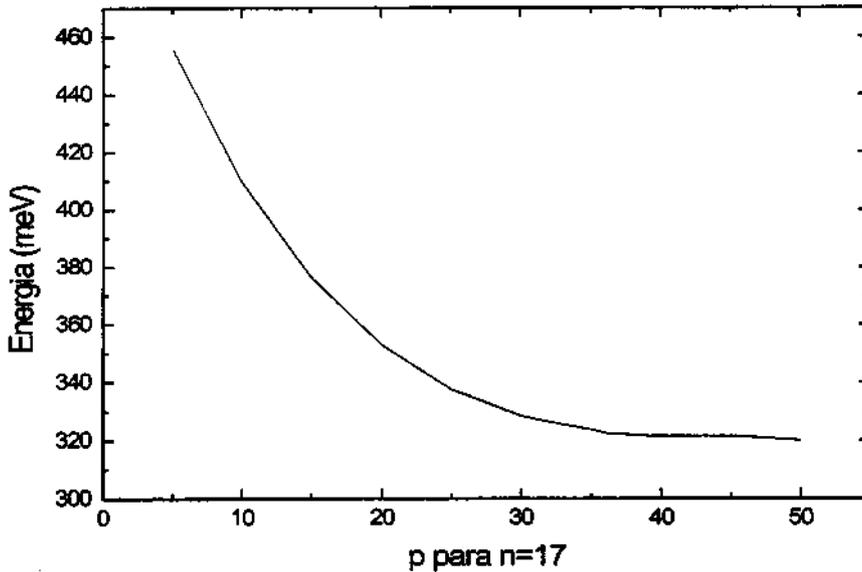


Figura 3.2: Teste de convergência, usamos 17 elementos do tipo $\phi_{nm}(\rho, \varphi)$ e variamos o número de elementos $\chi_p(z)$. A energia converge se usamos 40 elementos do tipo $\chi_p(z)$.

Na (Fig 3.6) é mostrado o comportamento de $P_z(z)$ em função de z para os mesmos estados da (Fig 3.5).

Para ratificar nossa comparação dos estados do QD com os estados atômicos, os estados com $m = 0$ apresentam máxima probabilidade em $\rho = 0$, que é um comportamento típico dos estados s atômicos. Enquanto os outros estados ($m = 1, 2, 3, \dots$) têm probabilidade nula em $\rho = 0$ e mesmo número de nós que o estado atômico correspondente.

Note, observando o gráfico da (Fig 3.6), que o pico da função de onda desloca-se em direção ao poço com o aumento da energia do estado. Isso quer dizer que os elétrons nesses estados encontram-se menos confinados no QD, como era de se esperar.

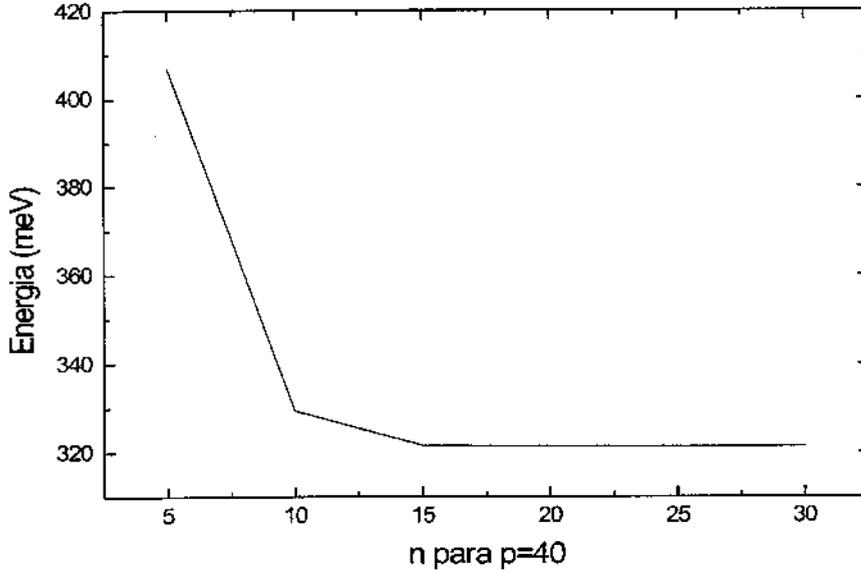


Figura 3.3: Teste de convergência, usamos 40 elementos do tipo $\chi_p(z)$ e variamos o número de elementos $\phi_{nm}(\rho, \varphi)$. A energia converge se usamos 17 elementos do tipo $\phi_{nm}(\rho, \varphi)$.

3.2 Influência dos QDs na cálculo autoconsistente

Vamos considerar agora o problema da transferência de cargas em uma amostra dopada moduladamente na presença dos QDs. Para isso, utilizamos os resultados e a metodologia do capítulo anterior introduzindo uma camada de QDs, os quais podem estar carregados. Este problema é de grande complexidade quando resolvido tridimensionalmente. Vamos buscar uma solução aproximada que permita obtermos uma ordem de grandeza da influência dos QDs na transferência de carga.

Os QDs são aleatoriamente distribuídos em toda a amostra. Em uma primeira aproximação, vamos considerar que efeito conjunto dos QDs pode ser representado por um plano localizado em uma certa posição \bar{z} , e com densidade média de carga (σ_{dot}) constante igual a $e \cdot N_{in} N_{dot}$, onde \bar{z} é dado pela seguinte expressão:

$$\bar{z} = \frac{1}{N_{in}} \sum_i^N d_i \langle \psi_i | z | \psi_i \rangle \quad (3.16)$$

onde N é o número total de estado ligados e d_i é a degenerescência de cada estado. N_{dot} é a densidade de QDs na amostra; N_{in} é o número de elétrons que

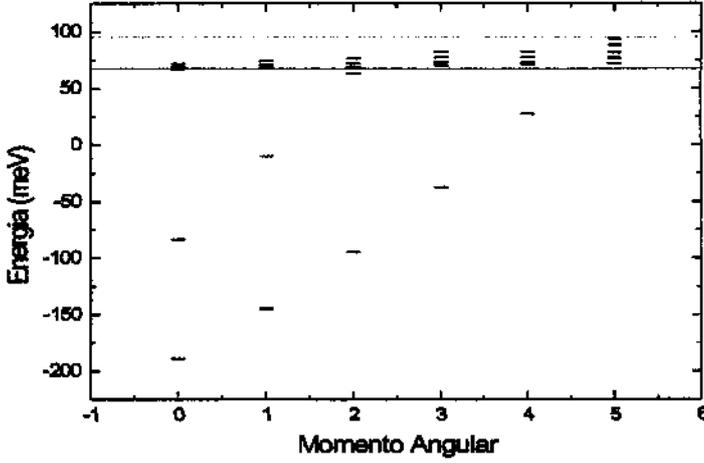


Figura 3.4: Energia dos estados do QD na presença de um gás bidimensional de elétrons em função do momento angular; em vermelho é mostrado o nível do estado fundamental do poço e em verde o nível de Fermi.

estão confinados no QD, calculado pela expressão:

$$N_{in} = \sum_i^N d_i N_i \quad (3.17)$$

O Hamiltoniano desse sistema é:

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_{B1} Y \left[-z + \frac{L}{2} \right] + V_{B2} Y \left[z - \frac{L}{2} \right] + eN_{in} \Phi_{dot}(z) - e\Phi_{sc}(z) \right] \psi(z) \\ = E\psi(z) \quad (3.18)$$

Onde $\Phi_{dot}(z)$ é o potencial da placa que simula os QDs. $\Phi_{dot}(z)$ tem solução exata e é dado por (ver apêndice H):

$$\Phi_{dot}(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } z < \bar{z} \\ \frac{4\pi e}{\kappa} \sigma_{dot}(z - \bar{z}) & \text{se } z > \bar{z} \end{cases} \quad (3.19)$$

Da (Fig 3.4) vemos que estão confinados dois estados de degenerescência 2 e 5 estados de degenerescência 4, ou seja, 24 elétrons estariam confinados no QD. Vemos,

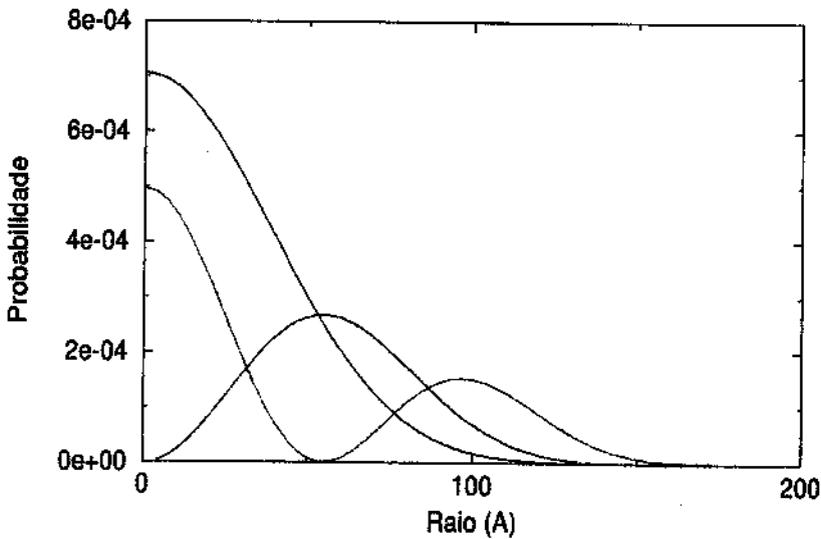


Figura 3.5: Probabilidade integrada da função de onda do elétron no QD em função de ρ . Em preto, temos o estado fundamental; em vermelho temos o primeiro estado excitado para $m = 0$ e em verde temos o estado menos energético para $m = 1$.

porém, que os elétrons do estado 1g ($m=4$) têm energias muito próximas do estado fundamental do poço, de forma que estes podem ser promovidos termicamente para o contínuo, assim sendo, não consideraremos esses estados como ocupados. Com isso, temos 20 elétrons confinados no QD.

Devido ao tamanho finito dos QDs, existe uma densidade máxima de QDs que a amostra pode ter. A área ocupada por um único QD de raio ρ_0 é dada por $\pi\rho_0^2$, então a densidade máxima de QDs que a amostra pode apresentar é:

$$N_{dot}^{max} = (\pi\rho_0^2)^{-1} \quad (3.20)$$

A (Fig 3.7) nos mostra como a presença dos QDs afetam a transferência de cargas para o poço.

Vemos que a densidade de portadores no poço diminui com o aumento da densidade de QDs. Esta diminuição de elétrons transferidos para o poço deve-se à transferência desses elétrons para os QDs. O aumento no total de elétrons é justificado pois quando se leva em conta os QDs, existem estados acessíveis com menor energia do que o poço, facilitando a transferência de carga. Observamos que o efeito

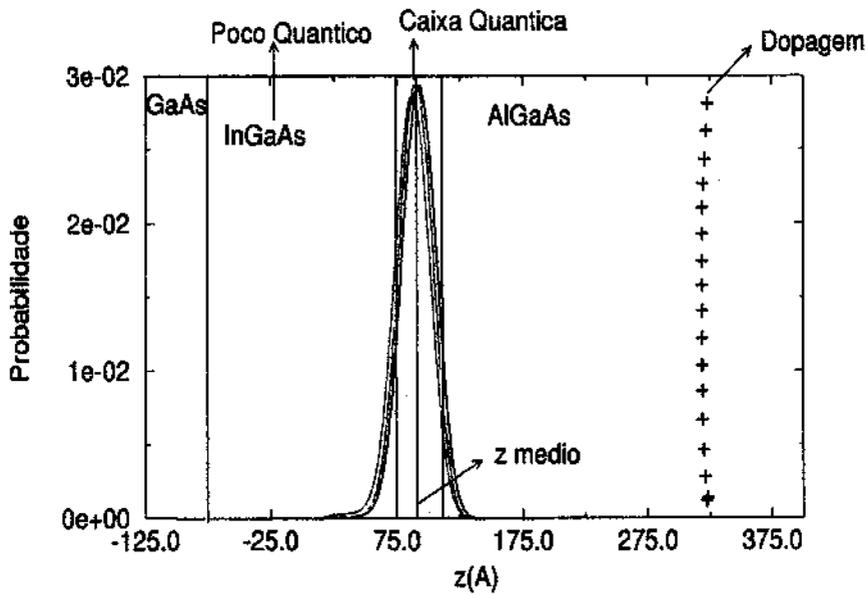


Figura 3.6: Probabilidade integrada da função de onda em função de z . Em preto temos o estado fundamental, em vermelho o o primeiro estado excitado para $m = 0$ e em verde, o estado menos energético para $m = 1$. Também são indicados o z médio dos estados confinados no QD e a região dos doadores ionizados.

mais significativo é a transferência de elétrons do poço para os QDs. A maior transferência de carga total é pequena e não compensa o preenchimento dos estados do poço, ocorrendo um esvaziamento deste.

Na (Fig 3.8) é mostrado a variação do nível do estado fundamental do poço em função da densidade de QDs na amostra. O zero de energia é o ponto de mais baixa energia da banda de condução.

A energia do estado fundamental diminui com o aumento da densidade de QDs na amostra. Essa diminuição já era esperada, pois, uma vez que a densidade de elétrons no poço diminui, há um confinamento da função de onda, a qual, estende-se mais no poço. A diminuição do nível de Fermi, que é mais acentuada do que a do nível do estado fundamental, também é observada e deve-se ao maior número de estados disponíveis à baixa energia, o que leva à maior transferência de carga, já discutida.

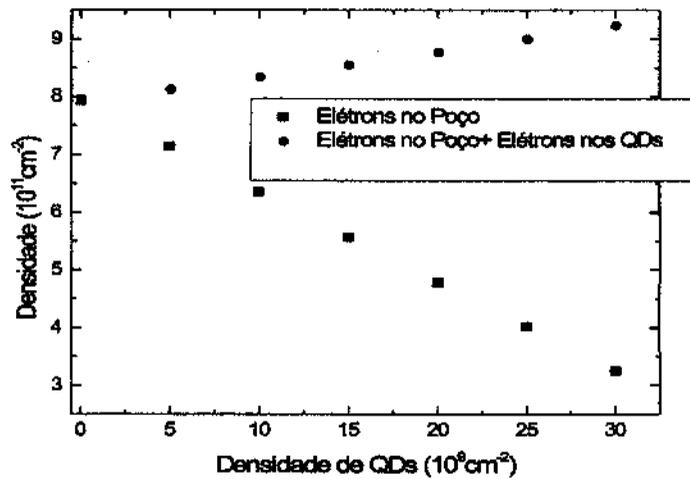


Figura 3.7: Comportamento da densidade de elétrons no poço em função da variação da densidade de QDs na amostra (em preto). Total dos elétrons (QDs+poço) em vermelho

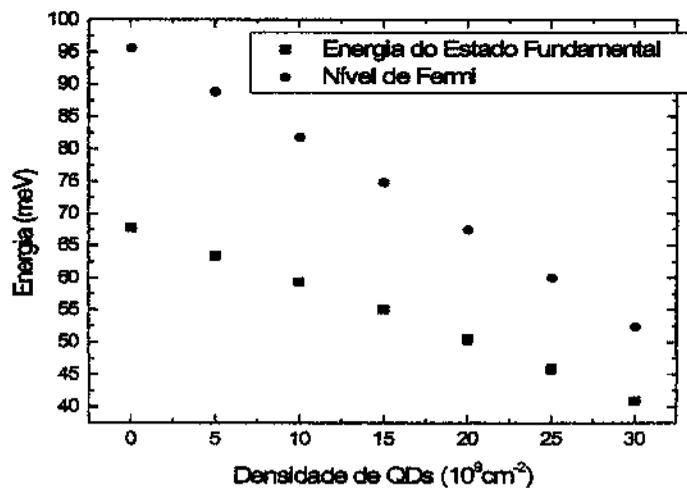


Figura 3.8: Energia do estado fundamental do poço em função da densidade de QD (em preto), também é mostrado a nível de Fermi (vermelho).

Capítulo 4

Estados Excitônicos em Caixas Quânticas Semicondutoras do Tipo-II

No capítulo 2, vimos que portadores de carga podem ser criados através da técnica de dopagem. Outra forma de se criar portadores é através de excitação óptica. Um par elétron-buraco é criado quando se promove um elétron da banda de valência para a banda de condução, deixando, por isso, um buraco na banda de valência. O elétron e o buraco podem formar um estado ligado, ou éxciton, através da interação Coulumbiana.

Nesse capítulo, vamos verificar se o estado excitônico é um estado ligado e, se o for, calcular o estado fundamental através do cálculo variacional da sua função onda. Além disso, vamos estender o tratamento dado ao éxciton para o caso em que há excesso de cargas no QD. O complexo formado pelas cargas extras, no caso elétrons, é chamado de trión. O trión mais simples é formado por dois elétrons e um buraco e é conhecido como X^- .

Estamos interessados em uma amostra de *InP/GaAs*, que apresenta alinhamento de banda do tipo-II. Em amostras desse tipo, elétrons e buracos ocupam materiais diferentes. Neste caso, os elétrons estão confinados na região do *InP* enquanto que os buracos estão na região do *GaAs* e só interagem via interação Coulombiana. A (Fig. 4.1) mostra o alinhamento de banda dessa estrutura.

O Hamiltoniano do éxciton é:

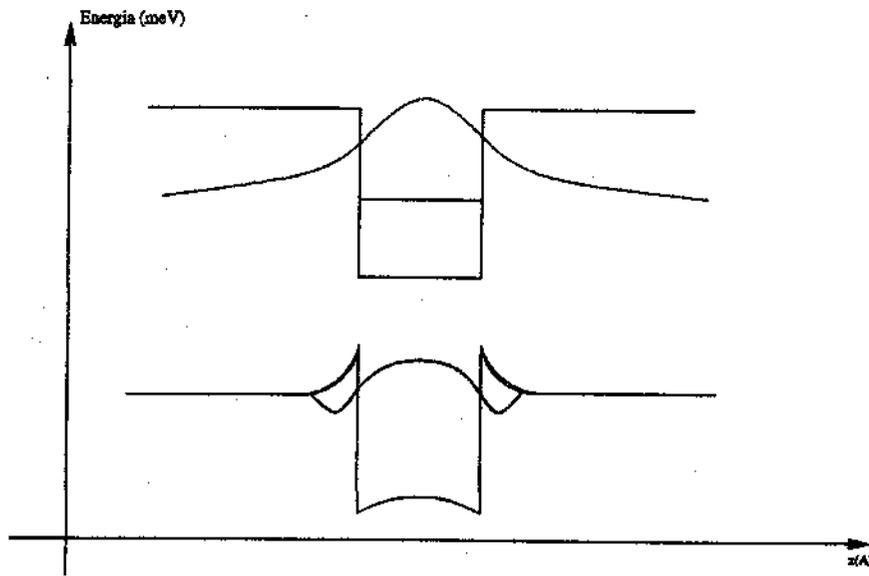


Figura 4.1: Alinhamento de banda em uma amostra do tipo-II, o entortamento da banda de valência representa o efeito do potencial Coulombiano. Elétrons e buracos estão em materiais diferentes. Em vermelho, representamos a função de onda do elétron e em azul a função de onda do buraco.

$$\begin{aligned}
 H_{exc} = & \frac{P_e^2}{2m_e^*} + V_e Y \left[z_e^2 - \frac{L^2}{4} \right] - V_e Y \left[z_e - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - \rho_e^2 - (z_e - z_0)^2 \right] \\
 & + \frac{P_h^2}{2m_h^*} + V_h Y \left[z_h^2 - \frac{L^2}{4} \right] + V_h Y \left[z_h - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - \rho_h^2 - (z - z_0)^2 \right] \\
 & - \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} = H_e + H_h + H_{e-h} \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

onde o subíndice e se refere às coordenadas do elétron e o subíndice h se refere às coordenadas de buraco. V_e é o potencial de barreira da banda de condução e V_h é o potencial de barreira na banda de valência.

O lado direito da equação (4.1) nos diz que podemos separar o Hamiltoniano do éxciton em um operador Hamiltoniano que atua apenas nas coordenadas do elétron, um operador que atua apenas nas coordenadas do buraco e outro operador

de interação que atua tanto nas coordenadas de elétron quanto nas coordenadas de buraco.

O elétron sofre um confinamento muito forte devido aos potenciais de barreira. Esse confinamento é muito mais forte do que o potencial Coulombiano, o qual, além de ser fortemente blindado (constante dielétrica alta ≈ 13.2), é ainda mais enfraquecido devido à separação espacial entre elétrons e buracos por se tratar de um material do tipo-II. Assim, numa primeira aproximação, podemos assumir que a função de onda do elétron não se modifica significativamente e escrever:

$$|\psi_{exc}\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \quad (4.2)$$

onde $|\psi_{exc}\rangle$ é a função de onda estado fundamental do éxciton e $\langle \vec{r}_e; \vec{r}_h | \psi_{exc} \rangle = \alpha(\vec{r}_e)\beta(\vec{r}_h)$

onde $|\alpha\rangle$ é a solução do elétron na ausência de buraco.

$$H_e|\alpha\rangle = E_e|\alpha\rangle \quad (4.3)$$

Nesta aproximação, estamos tratando o elétron como um centro de carga rígido que atuará sobre o buraco como um potencial eletrostático atrativo.

4.1 Cálculo da função de onda do elétron.

A equação (4.3) já foi resolvida no capítulo 3, mas, como estamos interessados apenas no estado fundamental do elétron, uma descrição completa, como a feita no capítulo 3, não é necessária. Conseguimos uma função de onda mais simples se a calcularmos variacionalmente. A forma da função de onda que utilizamos é:

$$\alpha(\rho_e; z_e; \varphi_e) = N_\lambda f(z_e)g(\rho_e) = N_\lambda f(z_e)e^{-\frac{\rho_e^2}{\lambda}} \quad (4.4)$$

onde λ é o parâmetro variacional e $f(z_e)$ é uma função a ser determinada e N_λ é a constante de normalização dada por (ver apêndice J):

$$N_\lambda = \sqrt{\frac{2}{\pi \lambda}} \quad (4.5)$$

Essa é uma função muito mais simples do que a obtida no capítulo 3, simplificando os cálculos da interação Coulombiana.

A energia do estado fundamental do elétron é obtida minimizando o valor esperado do Hamiltoniano (4.3), com o vínculo de normalização $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$:

$$\langle \alpha | H_e | \alpha \rangle - \langle \alpha | E_e | \alpha \rangle = 0 \quad (4.6)$$

Podemos reescrever a equação (4.6) como (ver apêndice I):

$$T_z |f\rangle + \bar{T}_\perp(\lambda) |f\rangle + \bar{V}(z_e, \lambda) |f\rangle = E_e |f\rangle \quad (4.7)$$

Onde T_z é o termo cinético associado à variável z_e , $\bar{T}_\perp(\lambda)$ é o termo cinético associado às variáveis ρ_e e φ_e e $\bar{V}(z_e, \lambda) = \langle g | V(\rho_e, z_e, \varphi_e) | g \rangle$

$\bar{V}(z_e, \lambda)$ e $\bar{T}_\perp(\lambda)$ são calculados explicitamente no apêndice J.

A equação (4.7) pode ser reescrita como (usando que $\{|\bar{r}_e^i\rangle\}$ forma uma base completa):

$$\frac{\partial^2 f(z_e)}{dz_e^2} = -\frac{2m_c^*}{\hbar^2} [E_e - \bar{T}_\perp(\lambda) - \bar{V}(z_e, \lambda)] f(z_e) \quad (4.8)$$

A equação (4.8) é numericamente solucionada no apêndice K em função de λ . O problema será completamente resolvido quando encontrarmos um λ tal que minimize a energia E_e .

Note que não incluímos o termo que corrige o potencial devido à difusão de In , como feito no capítulo 3, isso porque estamos interessados agora numa amostra que apresenta um poço quântico estreito ($L \approx 2.3 - 2.4$ monocamadas) e nota-se que em amostras desse tipo, a concentração de In é praticamente a mesma que a concentração no QD [16].

4.1.1 Resultados

Com a finalidade de comparar o método variacional com o cálculo feito no capítulo 3, e com resultados de Hawrylak e Wojs[17], fizemos um cálculo para uma amostra de $GaAs/In_{0.24}Ga_{0.76}As/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ que apresenta os seguintes parâmetros: $L = 16$ Å; $H = 44$ Å; $\rho_0 = 180$ Å.

A (Fig 4.2) nos mostra o comportamento da energia com a variação de λ . Um mínimo é encontrado em $\lambda = 83$ Å e para esse λ a energia obtida é 105.5 meV, enquanto a mesma estrutura calculada pelo método do capítulo anterior nos dá uma energia de 101.5 meV, uma diferença menor que 4%. O primeiro método nos dá uma

solução melhor (energia mais baixa), o que já é esperado uma vez que temos mais parâmetros variacionais. No entanto, ambas soluções são suficientemente próximas e estão em bom acordo com a referência [17].

Vamos comparar as probabilidades integradas para ver a concordância da função de onda entre os dois métodos no cálculo. A (Fig 4.3) nos mostra o gráfico de P_ρ em função de ρ . Em preto, é mostrado $P_\rho(\rho)$ calculado pelo método do capítulo 3 e em vermelho mostramos $P_\rho(\rho)$ calculado pelo método variacional. Na (Fig 4.4) comparamos $P_z(z)$, onde em preto é mostrada a probabilidade integrada calculada pelo método do confinamento no cilindro e em vermelho a probabilidade integrada calculada variacionalmente.

Embora o último procedimento variacional só nos forneça o estado fundamental do elétron, ele nos é bastante útil pois fornece a função de onda desse estado numa forma bastante simples, simplificando os cálculos que seguem. O método do cilindro, por sua vez, nos fornece uma descrição bastante mais completa, incluindo estados excitados, mas a forma da função de onda é mais complexa.

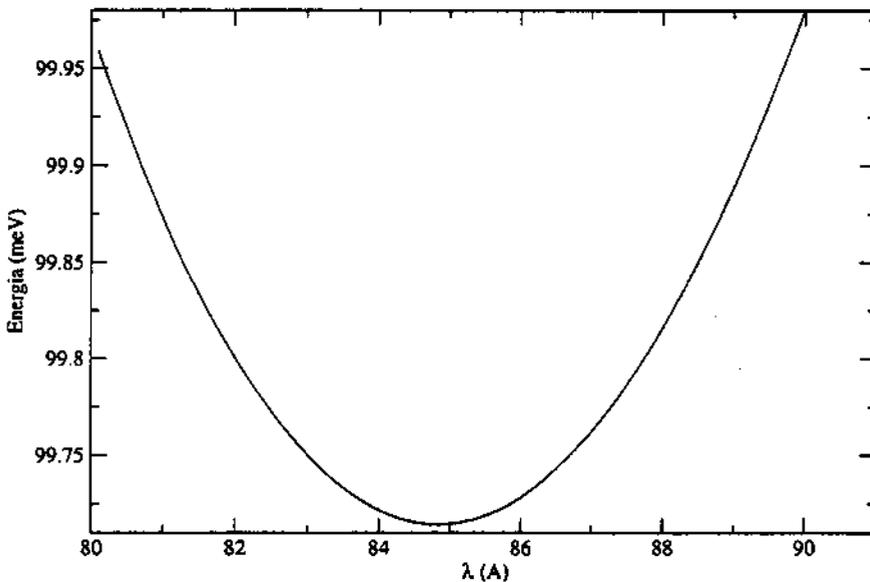


Figura 4.2: Comportamento da energia em função de λ

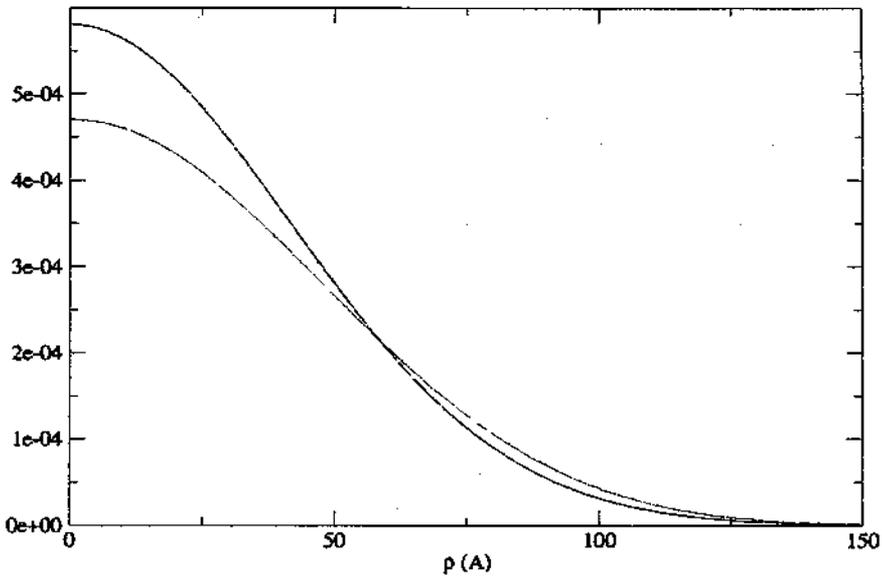


Figura 4.3: Comportamento de P_ρ em função de ρ . Em preto, P_ρ calcula do pelo método variacional e em vermelho calculado pelo método do cilindro.

Estamos interessados agora numa amostra com geometria idêntica àquela que acabamos de calcular, porém, a amostra é de *InP/GaAs*, de forma que o potencial de barreira é: $V_e = 130$ meV [18]. Refizemos os cálculos para esse potencial e a energia do estado fundamental encontrada é 69.48 meV.

4.2 Cálculo da função de onda do buraco.

Uma vez determinada a função de onda do elétron, o problema que nos resta é calcular a função de onda do buraco.

Na aproximação que consideramos deduzimos um Hamiltoniano efetivo para o buraco através da seguinte expressão:

$$[H_h + \langle \alpha | H_{e-h} | \alpha \rangle] \beta(\vec{r}_h) = E_h \beta(\vec{r}_h) \quad (4.9)$$

Note que $\langle \alpha | H_{e-h} | \alpha \rangle$ é o potencial Coulombiano que o buraco sente. Para estabelecermos a forma para a função variacional $\beta(\vec{r}_h)$, devemos conhecer a forma do potencial efetivo que atua no buraco. Por potencial efetivo entenda-se a soma

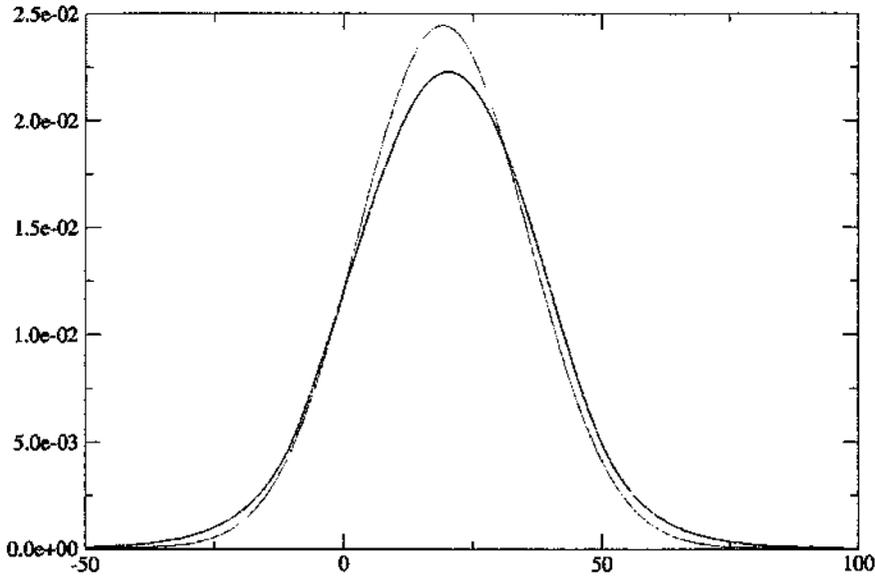


Figura 4.4: Comportamento de P_z em função de z . Em preto, P_z calculado pelo método variacional e em vermelho pelo método do cilindro.

do potencial Coulombiano com o potencial de barreira, o qual é dado pela seguinte expressão:

$$V_{ef}(\vec{r}_h) = V_h Y \left[z_h^2 - \frac{L^2}{4} \right] + V_h Y \left[z_h - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - \rho_h^2 - (z - z_0)^2 \right] - \frac{e^2}{\kappa} \langle \alpha \left| \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right| \alpha \rangle \quad (4.10)$$

O último termo da equação (4.10), que é referente ao termo Coulombiano sentido pelo buraco, é escrito como (ver apêndice L):

$$\frac{e^2}{\kappa} \langle \alpha \left| \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right| \alpha \rangle = \int_0^\infty dk J_0(k\rho_h) e^{-\frac{\hbar^2 \lambda^2}{8}} \int_{-\infty}^\infty dz_e |f(z_e)|^2 e^{-k|z_e - z_h|} \quad (4.11)$$

Lembrando que λ é um parâmetro conhecido.

A (Fig 4.5) mostra um corte do $V_{ef}(\vec{r}_h)$, em $z_h = \frac{L}{2}$, em função de ρ_h . Nesse ponto o potencial efetivo é escrito como:

$$V_{ef}(\vec{r}_h) = V_{ef}(\rho_h) = V_h Y \left[r_0^2 - \rho_h^2 - \left(\frac{L}{2} - z_0 \right)^2 \right] +$$

$$\frac{e^2}{\kappa} \int_0^\infty dk J_0(k\rho_h) e^{-\frac{k^2\lambda^2}{8}} \int_{-\infty}^\infty dz_e |f(z_e)|^2 e^{-k|\frac{L}{2}-z_e|} \quad (4.12)$$

As integrais são resolvidas numericamente.

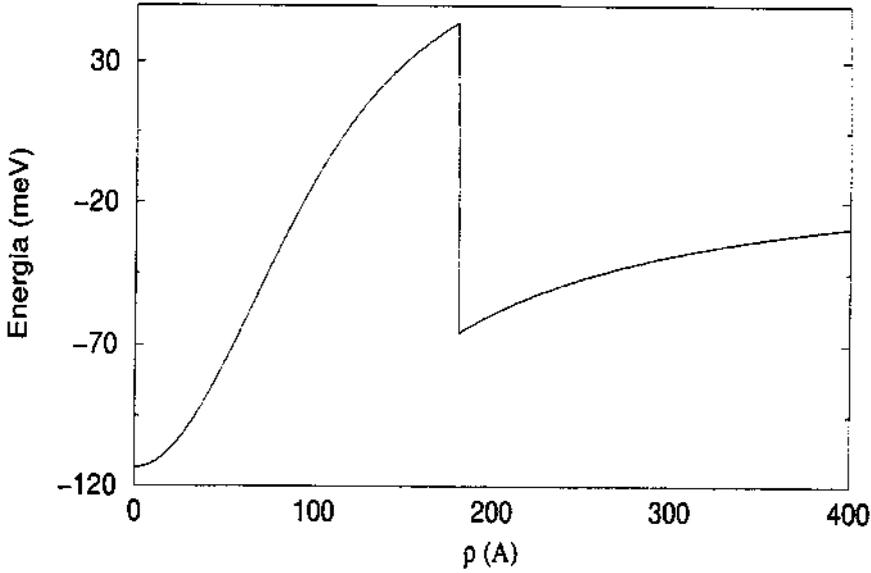


Figura 4.5: Corte do potencial efetivo sentido pelo buraco em $z_h = \frac{L}{2}$. Note que esse é o potencial do buraco e não o potencial do elétron (que tem sinal oposto ao potencial de buraco), portanto, um mínimo absoluto de energia é encontrado em $\rho = 0$.

Na (Fig 4.6) mostramos um corte do potencial efetivo em $\rho_h = 0$. No pontos $\rho_h = 0$ o potencial efetivo é escrito como:

$$V_{ef}(\vec{r}_h) = V_{ef}(z_h) = V_h Y \left[z_h^2 - \frac{L^2}{4} \right] + V_h Y \left[r_0^2 - (z_h - z_0)^2 \right] - \int_0^\infty dk e^{-\frac{k^2\lambda^2}{8}} \int_{-\infty}^\infty dz_e |f(z_e)|^2 e^{-k|z_e - z_h|} \quad (4.13)$$

As integrais também são resolvidas numericamente.

Olhando (Fig 4.5) e (Fig 4.6), podemos dar a forma da função de onda variacional do buraco. Primeiro, olhando a simetria cilíndrica, vemos que o estado fundamental

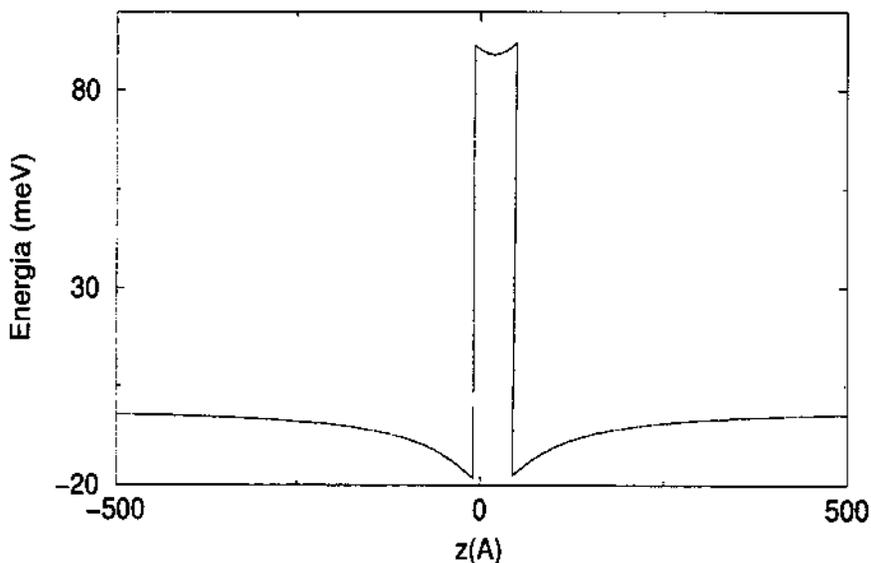


Figura 4.6: Corte do potencial efetivo sentido pelo buraco em $\rho_h = 0$. Aqui, novamente mostramos o potencial de buraco, que é diferente do potencial de elétron. Dois mínimos são encontrados próximos à interface *InP/GaAs*.

não deve ter dependência em φ_h . O potencial em ρ_h sugere que o estado fundamental esteja centrado na origem. Embora haja um mínimo local na interface, ele não deve influenciar os primeiros estados e pode ser desprezado na construção da função de onda. Próximo da origem o potencial pode ser aproximado por um oscilador harmônico, sugerindo uma função de onda variacional do tipo:

$$f(\rho_h) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\rho_h^2}{\lambda_1^2}} \quad (4.14)$$

onde A é a constante de normalização, apêndice J.

O potencial em z_h apresenta uma forte barreira repulsiva na região do QD, com uma região atrativa nas interfaces do poço quântico e do QD. A função de onda deve apresentar dois máximos em torno dessas regiões.

Procurando uma expressão simples, vamos escrever na forma de uma soma de gaussianas:

$$g(z_h) = B \left[e^{-\frac{(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + e^{-\frac{(z_h + \frac{L}{2} + H + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} \right] \quad (4.15)$$

Onde B é a constante de normalização, ver apêndice M. λ_2 e λ_3 são parâmetros variacionais com λ_3 determinando a posição dos picos da função de onda e λ_2 a extensão da mesma.

A função de onda variacional total se escreve, então, como:

$$\beta(z_h, \rho_h) = f(\rho_h)g(z_h) \quad (4.16)$$

Como fizemos no caso do elétron, devemos encontrar λ_1 , λ_2 , λ_3 e que minimizem a energia, que é dada por:

$$\langle \beta | H_h + H_{e-h} | \beta \rangle = \langle \beta | T_h | \beta \rangle + \langle \beta | V_{ef}(\rho_h, z_h) | \beta \rangle = E_h \quad (4.17)$$

onde $T_h = \frac{P_h^2}{2m_h^*}$ e pode ser escrito como:

$$T_h = T_{\perp} + T_{z_h} \quad (4.18)$$

T_{\perp} é a parte da energia cinética associada com as coordenadas ρ_h e φ_h , enquanto que T_{z_h} é a parte da energia cinética associada com a coordenada z_h . Dessa forma, o primeiro termo da equação (4.17) pode ser escrito como:

$$\langle \beta | T_h | \beta \rangle = \langle \beta | T_{\rho_h} | \beta \rangle + \langle \beta | T_{z_h} | \beta \rangle \quad (4.19)$$

No apêndice N calculamos os dois termo do lado direito da equação (4.19) e, dessa forma, determinamos a parte cinética da energia do buraco.

O termo de energia referente ao potencial efetivo pode ser escrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \langle \beta | V_{ef}(\rho_h, z_h) | \beta \rangle &= \langle \beta | V_h Y \left[z_e^2 - \frac{L^2}{4} \right] | \beta \rangle + \langle \beta | V_h Y \left[z_h - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - \rho_h - (z - z_0)^2 \right] | \beta \rangle \\ &\quad - \langle \beta | \int_0^{\infty} dk e^{-\frac{k^2 \lambda^2}{6}} \int_{-\infty}^{\infty} dz_e |f(z_e)|^2 e^{-k|z_e - z_h|} | \beta \rangle \end{aligned} \quad (4.20)$$

No apêndice O calculamos os termos da equação (4.20) e dessa forma determinamos a fração de energia correspondente ao potencial de barreira e à interação elétrica.

Os termos de energia que acabamos de calcular estão em função de λ_1 , λ_2 e λ_3 . O problema será completamente resolvido quando acharmos os parâmetros para os quais a energia seja mínima.

4.2.1 Resultados

Os parâmetros para o buraco são: $m_v^* = 0.4 m_0$ [13], $V_h = 110$ meV [18]. Para o elétron, utilizamos os mesmos parâmetros do cálculo anterior.

A existência de um mínimo no funcional indica a existência de um estado ligado. Experimentalmente [11], encontra-se um pico excitônico na energia $E_{foton}^0 = E_h^{X^0} + E_g + E_e$, no espectro de fotoluminescência. Onde E_g é a energia do gap, a diferença de energia entre o mínimo da banda de condução e o máximo da banda de valência, $E_h^{X^0}$ representa a energia do buraco e E_e é o nível de energia do elétron no poço. Este resultado sugere a existência de um estado ligado, embora devemos ter em mente que uma ressonância também se manifesta na forma de um pico na luminescência.

A (Fig 4.7) mostra a variação da energia em função de λ_1 enquanto λ_2 é mantido fixo em 79 Å; λ_3 é fixado em 80 Å. Nota-se claramente um mínimo de energia para $\lambda_1 = 128$ Å.

O mesmo tipo de gráfico é mostrado na (Fig 4.8), mas nessa figura, fixamos λ_1 em 128 Å; variamos λ_2 e λ_3 foram fixados nos mesmos valores que usamos para o gráfico da (Fig 4.8). O mínimo de energia é encontrado para $\lambda_2 = 79$ Å. A (Fig 4.9) mostra a variação da energia em função de λ_3 com $\lambda_1 = 128$ Å e $\lambda_2 = 79$ Å.

O conjunto de gráficos mostrados nas (Fig 4.7), (Fig 4.8) e (Fig 4.9) nos diz que existe um conjunto de parâmetros para os quais a energia é mínima, ou seja, existe um estado ligado e encontra-se um pico na transição $|\psi_{exc}\rangle \rightarrow |\psi_{fund}\rangle$, onde $|\psi_{fund}\rangle$ é o estado fundamental, com a banda de valência completamente preenchida e a banda de condução vazia. A minimização em λ_1 , λ_2 e λ_3 é realizada variando os três parâmetros de forma a evitar mínimos locais. Obtemos, para o estado fundamental: $\lambda_1 = 128$ Å, $\lambda_2 = 79$ Å e $\lambda_3 = 80$ Å. O nível de energia encontrado para o buraco é -4.46 meV, onde o zero de energia é o topo da banda de condução no *GaAs*.

Da mesma forma que fizemos para o elétron, definimos as probabilidades integradas para o buraco. Na (Fig 4.11), mostramos o comportamento de $P_\rho(\rho_h)$ e na

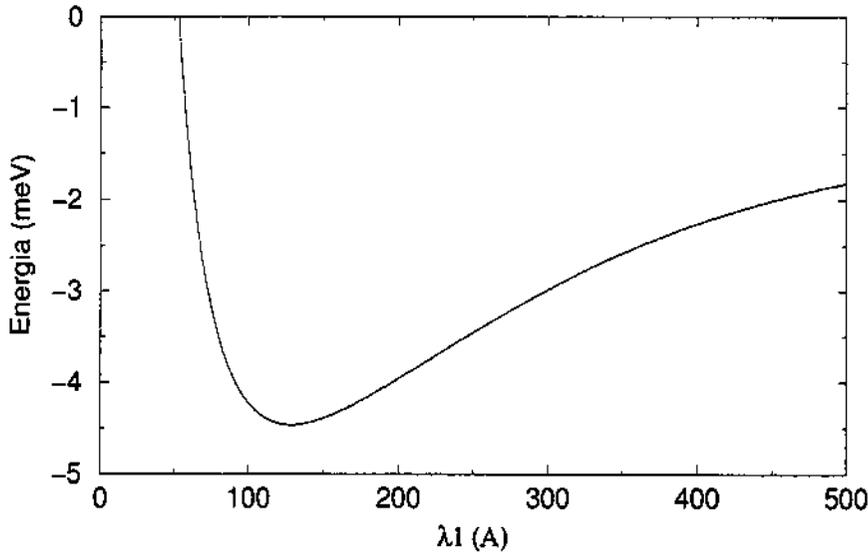


Figura 4.7: Comportamento da energia em função de λ_1 .

(Fig 4.12), mostramos o comportamento de $P_z(z_h)$, onde $P_\rho(\rho_h)$ e $P_z(z_h)$ são dadas por:

$$P_\rho(\rho_h) = A^2 e^{-\frac{2\rho_h^2}{\lambda_1^2}} \quad (4.21)$$

$$P_z(z_h) = B^2 \left[e^{-\frac{(z_h + \frac{l}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + e^{-\frac{(z_h - \frac{l}{2} - \pi - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} \right]^2 \quad (4.22)$$

Nós consideramos também a possibilidade da função de onda em ρ_h estar deslocada da origem. Para isso, escrevemos a função variacional do tipo:

$$f_1(\rho_h) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\rho_h - \lambda_4)^2}{\lambda_1^2}} \quad (4.23)$$

A (Fig 4.10) mostra a variação da energia com λ_4 . Vemos, efetivamente, que a função de onda deve estar centrada em $\rho_h = 0$.

Observando a (Fig 4.12), vemos que a função de onda tem seus máximos a uma distância considerável das barreiras e está consideravelmente estendidas em

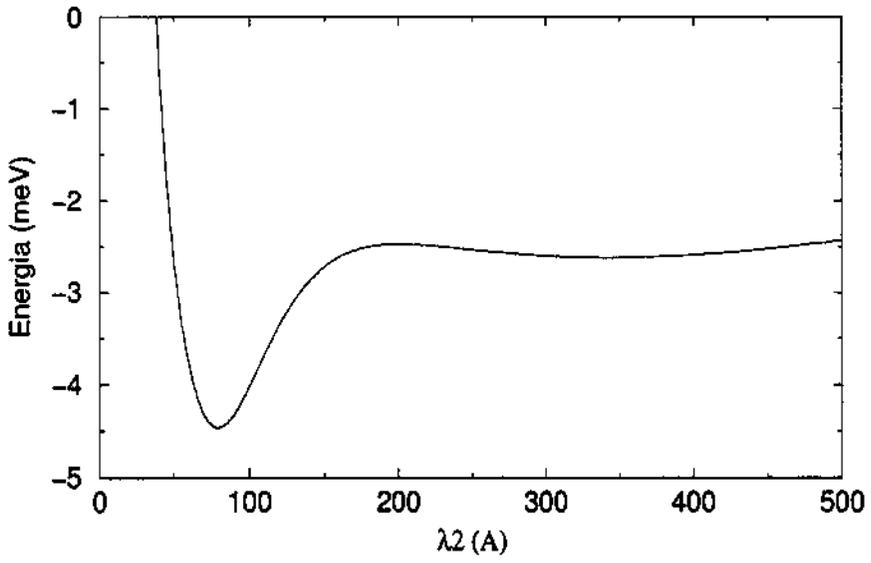


Figura 4.8: Variação da energia em função de λ_2

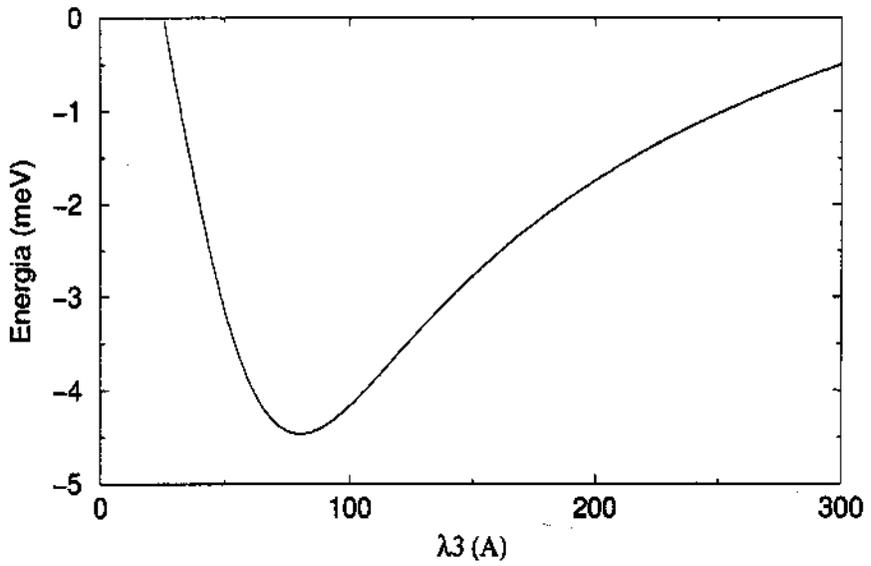


Figura 4.9: Variação da energia em função de λ_3

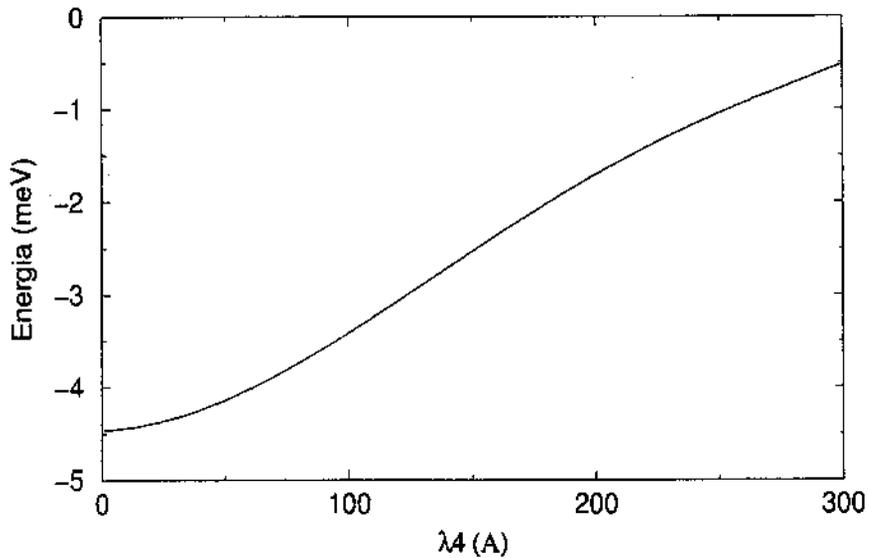


Figura 4.10: Variação da energia em função de λ_4 .

z_h . Isto ocorre porque o potencial confinador é fraco, fazendo com que o efeito da barreira exerça um forte influência. Em compensação, a função de onda em ρ_h está fortemente confinada na origem. Dvurechenskii e Yakimov, obtiveram funções de onda com comportamento semelhante para QDs de *Si/Ge* (que também apresentam alinhamento de banda do tipo-II) [19].

A energia de transição óptica é:

$$\hbar\omega_{foton} = E_{final} - E_{inicial} = E_g + E_h + E_e = 1.375eV \quad (4.24)$$

Com isso, determinamos o estado fundamental do complexo excitônico numa estrutura semicondutora do tipo-II.

4.3 Cálculo do X^- .

Em certas situações, a amostra pode ter um excesso de cargas nos QDs. Nos capítulos 2 e 3 estudamos o caso em que o excesso de portadores é consguído através

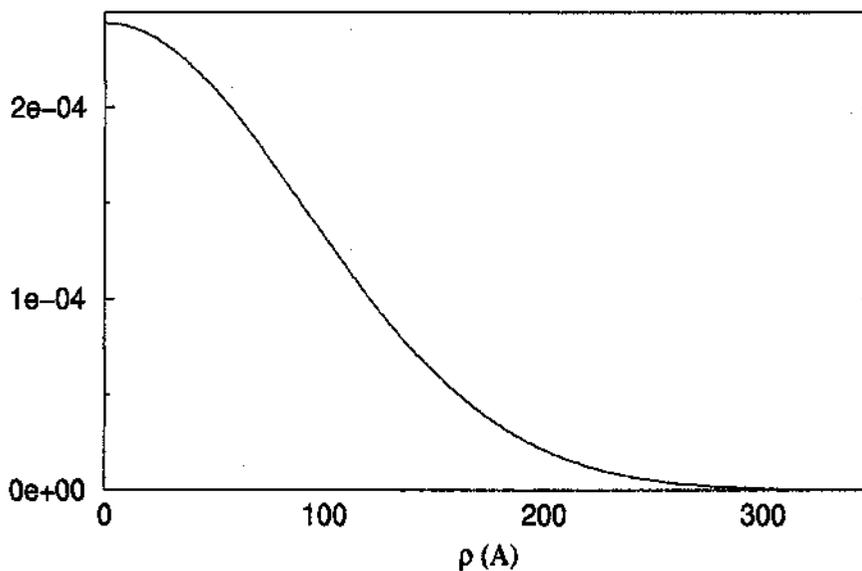


Figura 4.11: Variação da probabilidade integrada em função de ρ_h .

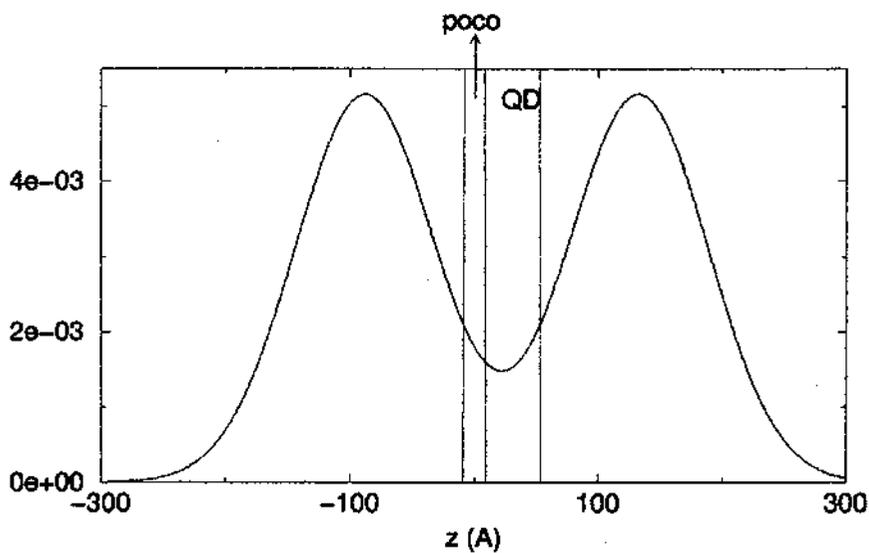


Figura 4.12: Probabilidade integrada em função de z_h . Também são representadas as regiões do poço quântico (em verde) e do QD (em vermelho)

da dopagem modulada e, no caso que estudamos, a dopagem modulada introduzida foi do tipo-n; de modo que a amostra apresenta excesso de elétrons. Outra situação de se criar excesso de cargas é através de excitações ópticas acima da barreira.

Nesse caso, quando excitados opticamente, os QDs podem apresentar complexos carregado. O caso mais simples é o trión X^- , onde temos 2 elétrons e um buraco.

Estendemos o cálculo variacional feito para o éxciton e calculamos a função de onda variacional do X^- , dentro da mesma aproximação rígida para os elétrons.

O Hamiltoniano do X^- é escrito como:

$$\begin{aligned}
H_{X^-} = & \frac{P_{e1}^2}{2m_c^*} + V_e Y \left[z_{e1}^2 - \frac{L^2}{4} \right] - V_e Y \left[z_{e1} - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - \rho_{e1}^2 - (z_{e1} - z_0)^2 \right] \\
& + \frac{P_{e2}^2}{2m_c^*} + V_e Y \left[z_{e2}^2 - \frac{L^2}{4} \right] - V_e Y \left[z_{e2} - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - \rho_{e2}^2 - (z_{e2} - z_0)^2 \right] \\
& + \frac{P_h^2}{2m_y^*} + V_h Y \left[z_h^2 - \frac{L^2}{4} \right] + V_h Y \left[z_h - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - \rho_h^2 - (z - z_0)^2 \right] \\
& - \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_{e1} - \vec{r}_h|} - \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_{e2} - \vec{r}_h|} + \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_{e1} - \vec{r}_{e2}|}
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Os dois elétrons estão confinados no QD enquanto o buraco é ligado pela interação Coulombiana com eles. Conforme já discutido, a interação Coulombiana é muito mais fraca que o potencial de barreira experimentado pelos elétrons e, como feito no caso do éxciton, vamos desprezar o potencial de interação entre elétron e buraco no cálculo do auto-estado do elétron. Agora, porém, temos a interação elétron-elétron que, embora seja pequena comparada com os potenciais de barreira, é um termo significativo e necessita ser calculado. Novamente, vamos considerar os elétrons “congelados” no estado fundamental do QD e consideraremos apenas esse estado.

A função de onda do estado fundamental do X^- é escrita da seguinte forma:

$$\psi_{X^-}(\vec{r}_h, \vec{r}_{e1}, \vec{r}_{e2}) \chi_{\text{singlete}} = \beta(\vec{r}_h) \alpha(\vec{r}_{e1}) \alpha(\vec{r}_{e2}) \chi_{\text{singlete}} \tag{4.26}$$

onde χ_{singlete} é o autoestado do operador Spin com autovalor 0:

$$\chi_{\text{singlete}} = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow; \downarrow\rangle + |\downarrow; \uparrow\rangle] \tag{4.27}$$

Escrevemos o Hamiltoniano (4.25) na forma:

$$H_{X^-} = H_{e1} + H_{e2} + H_h + H_{e1-h} + H_{e2-h} + H_{e1-e2} \quad (4.28)$$

Note que (4.28) é um operador muito parecido com o Hamiltoniano do éxciton e, por isso, vamos estender o tratamento dado ao éxciton para resolver (4.28). A energia do estado fundamental do X^- é dada por:

$$\langle \psi_{X^-} | H_{X^-} | \psi_{X^-} \rangle = \langle \alpha | H_{e1} | \alpha \rangle + \langle \alpha | H_{e2} | \alpha \rangle + \langle \alpha | \otimes \langle \alpha | H_{e1-e2} | \alpha \rangle \otimes | \alpha \rangle$$

$$\langle \beta | H_h | \beta \rangle + \langle \beta | \otimes \langle \alpha | H_{e1-h} | \alpha \rangle \otimes | \beta \rangle + \langle \beta | \otimes \langle \alpha | H_{e2-h} | \alpha \rangle \otimes | \beta \rangle = E_0 \quad (4.29)$$

As funções variacionais $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são as mesmas usadas no cálculo do éxciton. Resolver H_{X^-} significa achar os parâmetros variacionais que minimizem E_0 .

Todos os termos de (4.29) já foram resolvidos no cálculo anterior.

$$\langle \alpha | H_{e1} | \alpha \rangle = \langle \alpha | H_{e2} | \alpha \rangle = E_e \quad (4.30)$$

$$\langle \beta | H_h | \beta \rangle = E_{bar}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) \quad (4.31)$$

$$\langle \beta | \otimes \langle \alpha | H_{e1-h} | \alpha \rangle \otimes | \beta \rangle = \langle \beta | \otimes \langle \alpha | H_{e2-h} | \alpha \rangle \otimes | \beta \rangle = -E_{col}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) \quad (4.32)$$

onde E_{bar} é a energia relativa aos potenciais de barreira. e E_{col} é a energia relativa ao termo de ligação entre elétron e buraco.

Com as três últimas equações, podemos reescrever E_0 como:

$$E_0 = 2E_e + E_{bar}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) - 2E_{col}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) + E_{e1-e2} \quad (4.33)$$

Observe que E_e já é previamente conhecido e é apenas uma constante. Devemos encontrar os parâmetros que minimizem a energia. E_{e1-e2} é calculado no apêndice O e também é uma constante

O conjunto de parâmetro que minimiza a energia é: $\lambda_1 = 85 \text{ \AA}$; $\lambda_2 = 60 \text{ \AA}$; $\lambda_3 = 40 \text{ \AA}$. A energia do buraco, E_h , é $-14,33 \text{ meV}$, onde o zero de energia é o topo da banda

de valência do GaAs. Evidentemente a energia do buraco diminuiu pois o buraco fica mais ligado com a presença do segundo elétron.

A (Fig 4.13) mostra como fica a probabilidade integrada em função de ρ_h . A (Fig 4.14) mostra o comportamento da probabilidade integrada em função do de z_h . As (Fig 4.13) e (Fig 4.14) ratificam o que dissemos sobre o buraco estar mais ligado. Note que as gaussianas, que representam a parte em z_h da função de onda, estão mais próximas da interface com a barreira e, além disso, as funções de onda estão menos extendidas. O cálculo de E_{e1-e2} é direto e não depende dos parâmetros variacionais. Encontramos $E_{e1-e2} = 14,18$ meV (ver apêndice P). Este valor deve ser comparado perturbativamente com a diferença de energia entre os níveis do QD: $E_2 - E_1$, onde E_1 é a energia do estado fundamental e E_2 é a energia do primeiro estado excitado. Essa diferença é da ordem de 70 meV. Perturbativamente, se considerássemos acoplamento entre os níveis deviríamos ter [20]:

$$\left\langle \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_{e1} - \vec{r}_{e2}|} \right\rangle = I \pm J \quad (4.34)$$

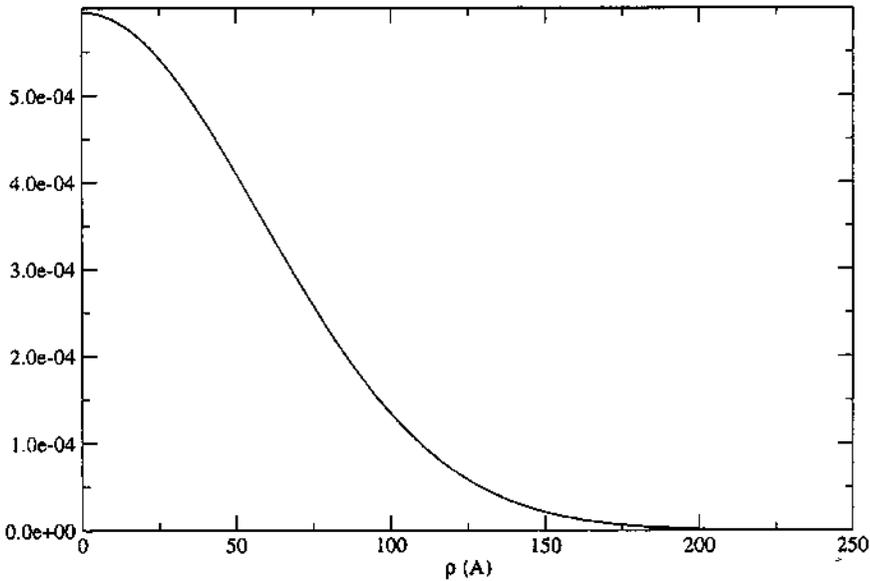


Figura 4.13: Densidade de probabilidade integrada em função de ρ_h .

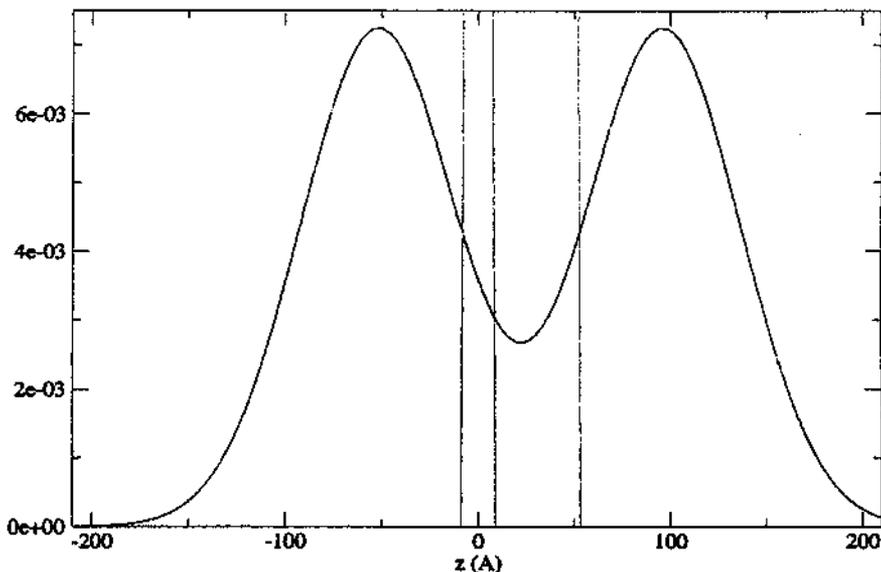


Figura 4.14: Densidade de probabilidade integrada em função de z_h . Em verde representamos o poço quântico e em vermelho o QD.

onde :

$$I = \int d^3\vec{r}_1 \int d^3\vec{r}_2 |\psi_{100}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{nlm}(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_{e1} - \vec{r}_{e2}|} \quad (4.35)$$

$$J = \int d^3\vec{r}_1 \int d^3\vec{r}_2 \psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{nlm}(\vec{r}_2) \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_{e1} - \vec{r}_{e2}|} \psi_{100}^*(\vec{r}_1) \psi_{nlm}^*(\vec{r}_2) \quad (4.36)$$

As integrais I e J são conhecidas, respectivamente, como integral direta e integral de troca. O sinal positivo (negativo) da equação (4.34) depende se o estado de spin é singlete (triplete). A integral I é obviamente positiva, também pode ser demonstrado que a integral J é positiva. Dessa forma, no estado singlete, o nível de energia é maior quando se considera acoplamento entre os níveis.

O pico excitônico no espectro de fotoluminescência ocorre, na transição $|\psi_{X-}\rangle \rightarrow |\psi_{fund}\rangle$, onde $|\psi_{fund}\rangle$ é o estado fundamental com a banda de valência totalmente cheia e um elétron na banda de condução. A energia do fóton liberado nessa transição é:

$$E_{foton}^{X-} = \hbar\omega_{X-} = E_g + E_e + E_{e1-e2} + E_h^{X-} = 1.379eV \quad (4.37)$$

$E_h^{X^-}$ é a energia de ligação do buraco. Com isso, determinamos o estado do X^- bem como a energia de interação entre o elétron extra e o complexo excitônico, além da energia de interação elétron-elétron. A separação entre a transição do X^- e a do éxciton é:

$$E_{foton}^{X^-} - E_{foton}^0 = E_{e1-e2} + E_h^{X^-} - E_h^{X^0} = 4,3meV \quad (4.38)$$

Isso quer dizer que a recombinação do tipo X^- desloca o pico de emissão em cerca de 4,3 meV para o azul em relação à recombinação do tipo X^0 .

A (Fig 1.3) é uma fotoluminescência da amostra que estamos estudando, retirada de [11]. O inset da (Fig 1.3) nos dá os picos de energia em função da intensidade do laser. Observamos que o deslocamento para o azul é da ordem de 70 meV, cerca de uma ordem de grandeza maior que o deslocamento para o azul devido à recombinação de complexos carregados. Então, embora esse tipo de recombinação contribua para o deslocamento para o azul, essa não é a principal causa desse efeito. O efeito que consideremos ser mais influente nesse deslocamento para o azul é a diferença nas dimensões dos QDs. Os QDs maiores têm menor energia e quando a intensidade do laser é baixa, isto é, poucos portadores são fotocriados, apenas os níveis desses QDs são ocupados. A medida em que se aumenta a intensidade do laser, todos esses níveis são ocupados, então os níveis dos QDs menores, que são mais energéticos, começam a ser ocupados.

Podemos fazer uma estimativa bastante simples da variação das dimensões dos QDs. A variação da energia é cerca de 70 meV (ver (Fig 1.3)). Como estamos interessados apenas na ordem de grandeza da variação, vamos considerar os QDs como sendo cubos de lado L . Para esses QDs, a energia do estado fundamental é dada por:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} \quad (4.39)$$

De modo que:

$$\frac{\Delta E}{\Delta L} = \frac{-2E}{L} \quad (4.40)$$

onde ΔE é a variância da energia e ΔL é variância nas dimensões dos QDs. Considerando L médio igual a 100\AA e $\Delta L \approx 30\text{\AA}$, então $\Delta E \approx 60\text{ meV}$, que é da ordem do deslocamento experimental.

Capítulo 5

Conclusão

Em relação ao problema da transferência de cargas em uma amostra dopada, uma análise simples nos deu uma idéia de como os QDs influenciam essa transferência. Nosso trabalho mostrou que ocorreu um pequeno aumento no número total de elétrons transferidos com o aumento da densidade de QDs em virtude de mais estados estarem acessíveis com a presença dos QDs. O aumento do número total elétrons transferido é da ordem de 10% enquanto a densidade de elétrons no poço diminuiu em torno de 50%. Basicamente, o efeito mais importante foi uma redistribuição dos elétrons, que deixaram de ocupar os estados do poço e passaram a ocupar os estados dos QDs (menos energéticos). Esse estudo sugere que um cálculo mais elaborado, como um cálculo autoconsistente em três dimensões não é necessário e que a maior parte dos efeitos dos QDs estão presentes nessa aproximação simples.

Também mostramos nesse trabalho, que em QDs do tipo-II, o estado excitônico forma um estado ligado, embora fracamente ligado, pois o potencial Coulombiano é fortemente blindado pela constante dielétrica e ainda mais enfraquecido devido à separação espacial entre elétron e buraco. Também mostramos que a presença de um elétron extra confinado no QD (X^-) liga mais o buraco. A interação elétron-elétron é mais forte que a interação entre o buraco e os elétrons. Isso faz com que a energia do fóton emitido durante a recombinação no X^- seja da ordem de 4 meV maior que a energia do fóton emitido na recombinação do éxcito para uma amostra de *InP/GaAs*. Esse efeito colabora para o deslocamento para o azul observado experimentalmente por Nakaema et. al. [11], mas não é o fenômeno preponderante, uma vez que o pico da fotoluminescência se desloca em cerca de 70 meV para o azul.

A origem do deslocamento para o azul encontra-se, provavelmente, na distribuição de tamanho dos QDs. Para observarmos os efeitos que estudamos, portanto, é necessário isolar um único (ou muito poucos) QDs.

Do ponto de vista teórico, a possível presença de elétrons nos estados do poço quântico, formando um gás de elétrons, deve blindar e enfraquecer a ligação Coulombiana. Este efeito pode alterar a estabilidade dos éxcitons e tríons considerados neste trabalho.

Apêndice A

Cálculo do Potencial Causado pelos Doadores Ionizados

Nesse apêndice, vamos resolver a seguinte equação de Poisson:

$$\frac{d^2\Phi_d(z)}{dz^2} = -\frac{4\pi e}{\kappa}\rho_d(z) \quad (\text{A.1})$$

onde $\rho_d(z)$ é dado por:

$$\rho_d(z) = \begin{cases} Nd & \text{se } \frac{L}{2} + W < z < \frac{L}{2} + W + L_D \\ 0 & \text{se } \frac{L}{2} + W > z > \frac{L}{2} + W + L_D \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Vamos separar a equação (A.1) em três regiões e usar as seguintes condições de contorno: O campo elétrico (que é a derivada do potencial) e o potencial devem ser contínuos em todo o domínio.

Assim, temos as seguintes equações:

$$\frac{d^2\Phi_I(z)}{dz^2} = 0 \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{d^2\Phi_{II}(z)}{dz^2} = -\frac{4\pi e}{\kappa}Nd \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{d^2\Phi_{III}}{dz^2} = 0 \quad (\text{A.5})$$

Onde a região *I* é: $z < \frac{L}{2} + W$, a região *II* é: $\frac{L}{2} + W < z < \frac{L}{2} + W + L_D$ e a região *III* é: $z > \frac{L}{2} + W + L_D$

Integrando essas equações, tenho

$$\frac{d\Phi_I(z)}{dz} = A \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{d\Phi_{II}(z)}{dz} = -\left(\frac{4\pi e}{\kappa} N_d z + B\right) \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{d\Phi_{III}(z)}{dz} = C \quad (\text{A.8})$$

onde A , B e C são constantes.

Essas equações fazem com que o campo seja naturalmente contínuo em todo o domínio, a não ser nas interfaces $z = \frac{L}{2} + W$ e em $z = \frac{L}{2} + W + L_D$ onde a continuidade deve ser imposta. Colocando $A = 0$ (fazendo isso, apenas fizemos com que o campo seja zero para $z < \frac{L}{2} + W$, o que é consequência da neutralidade de carga.) e usando que $\frac{d\Phi_I(\bar{z})}{dz} = \frac{d\Phi_{II}(\bar{z})}{dz}$, onde $\bar{z} = \frac{L}{2} + W$. Também devemos ter: $\frac{d\Phi_{II}(\bar{z})}{dz} = \frac{d\Phi_{III}(\bar{z})}{dz}$, onde $\bar{z} = \frac{L}{2} + W + L_D$. Com isso feito temos:

$$\frac{d\Phi_I(z)}{dz} = 0 \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{d\Phi_{II}(z)}{dz} = -\frac{4\pi e}{\kappa} (z - \bar{z}) \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{d\Phi_{III}(z)}{dz} = -\frac{4\pi e}{\kappa} L_D \quad (\text{A.11})$$

Integrando as três equações acima temos:

$$\Phi_I(z) = A' \quad (\text{A.12})$$

$$\Phi_{II}(z) = -\frac{4\pi e}{\kappa} \left(\frac{z^2}{2} - \bar{z}z\right) + B' \quad (\text{A.13})$$

$$\Phi_{III}(z) = -\frac{4\pi e}{\kappa} L_D z + C' \quad (\text{A.14})$$

Novamente as três equações nos garantem a continuidade em todo o domínio, menos nos pontos \bar{z} e \bar{z} . Nesses pontos, como fizemos anteriormente, utilizamos a condição física da continuidade fazendo: $\Phi_I(\bar{z}) = \Phi_{II}(\bar{z})$ e $\Phi_{II}(\bar{z}) = \Phi_{III}(\bar{z})$. Temos

a liberdade de escolher o zero do potencial (pois o que é importante é a diferença de potencial). Convenientemente, escolhemos como zero o ponto \bar{z} e assim o potencial fica:

$$\Phi_d(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } z < \bar{z} \\ -\frac{2\pi e}{\kappa} (z - \bar{z})^2 & \text{se } \bar{z} < z < \tilde{z} \\ -\frac{2\pi e}{\kappa} N_d L_D (2z + L_D - 2\tilde{z}) & \text{se } z > \tilde{z} \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

Apêndice B

Solução da Equação de Poisson por Integração Direta

$$\frac{d^2\Phi_e(z)}{dz^2} = -\frac{4\pi e}{\kappa} N_e |\psi(z)|^2 \Rightarrow \Phi_e(z) = -\frac{4\pi e}{\kappa} \int_{-\infty}^z dz' \int_{-\infty}^{z'} dz'' |\psi(z'')|^2 dz'' \quad (\text{B.1})$$

Nesse apêndice queremos mostrar que:

$$\int_{-\infty}^z dz' \int_{-\infty}^{z'} dz'' |\psi(z'')|^2 dz'' = z \int_{-\infty}^z dz' |\psi(z')|^2 - \int_{-\infty}^z dz' z' |\psi(z')|^2 \quad (\text{B.2})$$

Prova:

$$\frac{d}{dz} \left[z \int |\psi(z)|^2 dz \right] = \int |\psi(z)|^2 dz + z |\psi(z)|^2 \quad (\text{B.3})$$

$$\Rightarrow \int |\psi(z)|^2 dz = \frac{d}{dz} \left[z \int |\psi(z)|^2 dz \right] - z |\psi(z)|^2 \quad (\text{B.4})$$

$$\Rightarrow \int dz \int dz' |\psi(z')|^2 = \int \frac{d}{dz} \left[z \int |\psi(z)|^2 dz \right] dz - \int z |\psi(z)|^2 dz \quad (\text{B.5})$$

$$\Rightarrow \int dz \int dz' |\psi(z')|^2 = z \int |\psi(z)|^2 dz - \int dz z |\psi(z)|^2 \quad (\text{B.6})$$

Aplicando os limites de integração, temos:

$$\int_{-\infty}^z dz' \int_{-\infty}^{z'} dz'' |\psi(z'')|^2 dz'' = z \int_{-\infty}^z dz' |\psi(z')|^2 - \int_{-\infty}^z dz' z' |\psi(z')|^2 \quad (\text{B.7})$$

Apêndice C

Solução da Equação de Schrödinger pelo Método de Diferenças Finitas

Queremos resolver numericamente a seguinte equação diferencial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + \left[V_{B1} Y \left[-z + \frac{L}{2} \right] + V_{B2} Y \left[z + \frac{L}{2} \right] - e\Phi_{sc}(z) \right] \psi(z) = \quad (C.1)$$

$$E\psi(z)$$

Para isso, vamos confinar nosso sistema num poço de paredes de potencial infinito e de largura muito maior do que as dimensões do sistema que estamos interessados. Feito isso, discretizamos o espaço, ou seja, ao invés de tratar z como uma variável contínua, vamos tratá-la como uma variável discreta. Dessa forma, podemos fazer:

$$\frac{\partial \psi(z)}{\partial z} \approx \psi'(i) = \frac{\psi(i+1) - \psi(i)}{\Delta z} \quad (C.2)$$

onde Δz é a distância entre os pontos do espaço discretizado, ou seja $z_{i+1} - z_i$.

A derivada de segunda ordem é dada por:

$$\frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} \approx \frac{\psi'(i+1) - \psi'(i)}{\Delta z} = \frac{\psi(i+2) + \psi(i) - 2\psi(i+1)}{\Delta z^2} \quad (C.3)$$

Se z é um conjunto de n pontos do espaço e calculamos (C.1) nesses pontos, temos o seguinte conjunto de equações lineares acopladas:

$$\begin{aligned}
 \psi_2 &- 2\Omega_1\psi_1 + \psi_0 = E \psi_1 \\
 \psi_3 &- 2\Omega_2\psi_2 + \psi_1 = E \psi_2 \\
 &\vdots \\
 \psi_{n+1} &- 2\Omega_n\psi_n + \psi_{n-1} = E \psi_n
 \end{aligned} \tag{C.4}$$

onde $\Omega_i = \frac{\hbar^2}{2m^*} + V_{VB1_i} + V_{B2_i} - e\Phi_{sc_i}$

De acordo com a condições de contorno do problema, ou seja, a função de onda deve ser zero nas paredes no poço de potencial infinito, temos que $\psi(0) = \psi(n) = 0$. Então, escrevendo (C.4) na forma matricial, temos:

$$\begin{bmatrix}
 2\Omega_1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 1 & 2\Omega_2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & 1 & 2\Omega_3 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & 0 & 1 & 2\Omega_4 & 1 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 2\Omega_5 & 1 & \dots & 0 \\
 \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 2\Omega_{n-1} & 1 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 2\Omega_n
 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \psi_5 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{bmatrix} = E \cdot \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \psi_5 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{bmatrix}$$

Ou seja, temos um problema de auto-valor/auto-vetor. Como estamos interessado apenas no estado fundamental, encontrar a função de onda é calcular o auto-vetor associado ao menor auto-valor da equação acima, mais explicitamente, cada elemento do auto-vetor é o valor da função de onda num determinado ponto i .

Os elemetos de matriz Ω_i são dados por:

$$\Omega_i = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m^*} + V_{B1} + V_{B2} - e\Phi_{sc_i} & \text{se } i \times \Delta z < \frac{D-L}{2} \\ \frac{\hbar^2}{2m^*} - e\Phi_{sc_i} & \text{se } \frac{D-L}{2} < i \times \Delta z < \frac{D+L}{2} \\ \frac{\hbar^2}{2m^*} + V_{B1} + V_{B2} - e\Phi_{sc_i} & \text{se } i \times \Delta z > \frac{D+L}{2} \end{cases} \tag{C.5}$$

onde D é a largura do poço confinador e i é o i -ésimo ponto do espaço discretizado.

Em nosso caso, usamos um poço confinador de 1000 Å e discretizamos o espaço em 1000 pontos. Portanto, o problema de se encontrar $\psi(z)$ se resolve com a diagonalização de uma matriz banda 1000×1000. Como só o estado fundamental está ocupado, basta calcular o menor auto-valor e seu respectivo auto-vetor para que o

problema esteja solucionado. Optamos pela subrotina EVESF da IMSL para efetuar a diagonalização, uma vez que essa subrotina nos permite calcular apenas o menor auto-valor e seu respectivo auto-vetor.

Apêndice D

Relações Geométricas da Caixa Quântica

Suponha uma esfera de raio r_0 e cujas coordenadas do centro sejam $(0,0,z_0)$ e imagine que essa esfera seja cortada por um plano paralelo ao plano xy em $z = 0$, como mostrado na (Fig D.1)

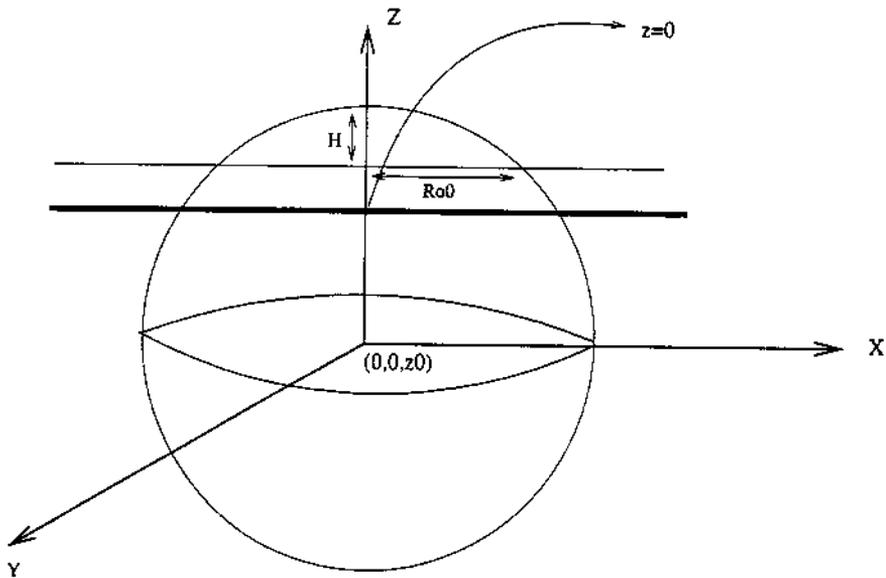


Figura D.1: Esfera cortada por um plano

A equação dessa esfera é:

$$x^2 + y^2 + (z - z_0)^2 = r_0^2 \quad (\text{D.1})$$

O centro de coordenadas está no centro do poço quântico. Da geometria do problema tenho que:

Para $x = y = 0 \Rightarrow z = H + \frac{L}{2}$, que, quando substituído na equação da esfera, nos dá:

$$\left(H + \frac{L}{2} - z_0\right)^2 = r_0^2 \Rightarrow z_0 = H + \frac{L}{2} - r_0$$

Em $z = \frac{L}{2} \Rightarrow x^2 + y^2 = \rho_0^2$, substituindo na equação da esfera, temos:

$$r_0^2 = \rho_0^2 + \left(\frac{L}{2} - H - \frac{L}{2} + r_0\right)^2 \quad (\text{D.2})$$

$$r_0^2 = \rho_0^2 + r_0^2 + H^2 - 2Hr_0 \quad (\text{D.3})$$

$$\Rightarrow r_0 = \frac{1}{2H} (\rho^2 + H^2) \quad (\text{D.4})$$

Apêndice E

Partícula Livre Confinada num Cilíndrico de Paredes de Potencial Infinitas

Nesse apêndice vamos resolver uma partícula livre confinada num cilindro de paredes de potencial infinito, de raio R e comprimento D

No interior do cilindro, a equação que temos que resolver é a seguinte:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi = E\psi \quad (\text{E.1})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$\psi(R, \varphi, z) = \psi\left(\rho, \varphi, \pm \frac{D}{2}\right) = 0 \quad (\text{E.2})$$

O Laplaciano, em coordenadas cilíndricas, é dado por:

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{E.3})$$

A solução pode ser escrita como:

$$\psi(\rho, \varphi, z) = N \cdot \alpha(\rho) \cdot \beta(\varphi) \cdot \chi(z) \quad (\text{E.4})$$

onde N é a constante de normalização.

A equação (G.1), em conjunto com a equação (F.3), aplicada em (F.4), nos dá o seguinte:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} N. \left[\chi(z) \beta(\varphi) \cdot \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \alpha(\rho)}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \chi(z) \alpha(\rho) \frac{\partial^2 \beta(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \alpha(\rho) \cdot \beta(\varphi) \cdot \frac{\partial^2 \chi(z)}{\partial z^2} \right]$$

$$= E \cdot N \cdot \alpha(\rho) \cdot \beta(\varphi) \cdot \chi(z) \quad (\text{E.5})$$

Dividindo toda a equação (F.5) por $N \cdot \alpha(\rho) \cdot \beta(\varphi) \cdot \chi(z)$, temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\alpha(\rho)} \cdot \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \alpha(\rho)}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\beta(\varphi)} \cdot \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \beta(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\chi(z)} \frac{\partial^2 \chi(z)}{\partial z^2} \right] = E \quad (\text{E.6})$$

a equação acima só é verdadeira para todo o domínio se e somente se cada um dos três termos da esquerda da equação forem constantes.

Então, a equação diferencial em z é:

$$\frac{1}{\chi(z)} \frac{\partial^2 \chi(z)}{\partial z^2} = -\frac{2m^*}{\hbar^2} E_z \quad (\text{E.7})$$

onde E_z é uma constante, que será associada à energia na direção z .

A solução da equação (F.7) é facilmente reconhecido como:

$$\chi(z) = \begin{cases} A \cos k_z z \\ B \sin k_z z \end{cases} \quad (\text{E.8})$$

onde $k_z = \sqrt{\frac{2m^* E_z}{\hbar^2}}$

Colocando as condições de contorno: que $\chi\left(-\frac{D}{2}\right) = \chi\left(\frac{D}{2}\right) = 0$, temos que:

$$E_z = \begin{cases} \frac{\pi^2 (n+1)^2 \hbar^2}{D^2 2m^*} \\ \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{D^2 2m^*} \end{cases} \quad (\text{E.9})$$

onde a primeira solução é para solução do tipo cos, com $n = 0, 2, 4, \dots$ e a segunda solução é para solução do tipo sin, com $n = 1, 3, 5, \dots$

Analisando agora a equação diferencial em φ e em ρ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\alpha(\rho)} \cdot \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \alpha(\rho)}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\beta(\varphi)} \cdot \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \beta(\varphi)}{\partial \varphi^2} \right] = E_{xy} \quad (\text{E.10})$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\beta(\varphi)} \cdot \frac{\partial^2 \beta(\varphi)}{\partial \varphi^2} = -\rho^2 \left[\frac{E_{xy} \cdot 2m^*}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha(\rho)} \cdot \frac{1}{\rho} \frac{\partial \alpha(\rho)}{\partial \rho} + \frac{1}{\alpha(\rho)} \frac{\partial^2 \alpha(\rho)}{\partial \rho^2} \right] \quad (\text{E.11})$$

A parte em φ fica:

$$\frac{1}{\beta(\varphi)} \cdot \frac{\partial^2 \beta(\varphi)}{\partial \varphi^2} = -m^2 \quad (\text{E.12})$$

$$\beta(\varphi) = e^{\pm im\varphi} \quad (\text{E.13})$$

Por simetria, $\beta(\varphi) = \beta(\varphi + 2\pi) \Rightarrow m = 0, 1, 2, \dots$

Agora, voltando à equação (F.10), e já tendo substituído (E.12), temos:

$$\frac{\partial^2 \alpha(\rho)}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \alpha(\rho)}{\partial \rho} + \left[\frac{2m^* E_{xy}}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\rho^2} \right] \alpha(\rho) = 0 \quad (\text{E.14})$$

fazendo a seguinte mudança de variável: $k_{xy}\rho = x$, com $k_{xy} = \sqrt{\frac{2m^* E_{xy}}{\hbar^2}}$, obtemos a seguinte:

$$\frac{d^2 \alpha(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d\alpha(x)}{dx} + \left[1 - \frac{m^2}{x^2} \right] \alpha(x) = 0 \quad (\text{E.15})$$

que é uma equação de Bessel de ordem m , que tem como solução: $J_m(x)$, que são funções de Bessel do primeiro tipo e de ordem m .

As funções de Bessel do segundo tipo não são usadas pois elas divergem na origem, não sendo, portanto, normalizáveis e, assim, não tem nenhum sentido físico.

A condição de contorno na interface é: $J(k_{xy}R) = 0$, temos então:

$$k_{xy}R = \alpha_{nm} \quad (\text{E.16})$$

onde α_{nm} é o n -ésimo zero da função de Bessel de ordem m . A partir dessa condição, temos que:

$$E_{xy} = \frac{(\alpha_{nm}\hbar)^2}{2m^* R^2} \quad (\text{E.17})$$

A constante de normalização é facilmente calculada exigindo que cada uma das funções de uma variável seja normal.

Assim:

$$A^2 \int_0^\pi \chi(z)^2 dz = 1 \quad (\text{E.18})$$

$$B^2 \int_0^{2\pi} \beta(\varphi)^2 d\varphi = 1 \quad (\text{E.19})$$

$$C^2 \int_0^R \rho \alpha(\rho)^2 d\rho = 1 \quad (\text{E.20})$$

A equação (E.18) é uma integral de um $\sin^2(\cos^2)$ no intervalo $[0, \pi]$, que facilmente resolvida:

$$A = \sqrt{\frac{2}{D}} \quad (\text{E.21})$$

A equação (E.19) é uma integral de uma exponencial complexa entre 0 e 2π , que também é facilmente resolvida, de forma que:

$$B = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{E.22})$$

A equação (E.20) é mais complicada; temos que:

$$C^2 \int_0^R d\rho \cdot \rho \cdot [J_m(\alpha_{nm}\rho)]^2 = 1 \quad (\text{E.23})$$

Fazendo a seguinte mudança de variável: $x = \frac{\rho}{R}$ e $a_{nm} = R \cdot \alpha_{nm}$, temos:

$$C^{-2} = R^2 \int_0^1 dx \cdot x \cdot [J_m(a_{nm}x)]^2 \quad (\text{E.24})$$

e usando a seguinte expressão:

$$\int dx \cdot x \cdot [J_m(ax)]^2 = \frac{x^2}{2} [(J_m(ax))^2 - J_{m-1}(ax)J_{m+1}(ax)] \quad (\text{E.25})$$

Podemos escrever (E.24) com a ajuda de (E.25):

$$C^{-2} = \frac{R^2}{2} [(J_m(\alpha_{nm}R))^2 - J_{m-1}(\alpha_{nm}R)J_{m+1}(\alpha_{nm}R)] \quad (\text{E.26})$$

Usando a relação de recorrência: $J_{m-1}(\alpha_{nm}R) = -J_{m+1}(\alpha_{nm}R)$ e usando que $J_m(\alpha_{nm}R) = 0$, temos:

$$C = \frac{\sqrt{2}}{R} \frac{1}{|J_{m+1}(\alpha_{nm}R)|} \quad (\text{E.27})$$

Apêndice F

Demonstração da Equivalência Entre Minimizar a Energia e Resolver um Problema de Autovalor/Autovetor

Nesse apêndice, vamos demonstrar que encontrar os $A_{n,m,p}$ que minimizem a energia da equação $H_{dot}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, onde podemos escrever $|\psi\rangle$ da seguinte forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{n,m,p} A_{n,m,p} |\psi_{n,m,p}\rangle \quad (\text{F.1})$$

sujeita ao vínculo $\langle\psi_{n,m,p}|\psi_{n,m,p}\rangle = \delta_{n,n}\delta_{m,m}\delta_{p,p}$, é equivalente a resolver a seguinte equação de auto-valor/auto-vetor:

$$\langle\psi_{p,n,m}|H|\psi_{p,n,m}\rangle \cdot \vec{A} = E \cdot \vec{A} \quad (\text{F.2})$$

Demonstração:

A energia mínima é dada pela seguinte equação:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (\text{F.3})$$

Escrevendo $|\psi\rangle$ na base dos $|\psi_{p,n,m}\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{n,m,p} A_{p,n,m} |\psi_{n,m,p}\rangle \quad (\text{F.4})$$

Aplicando (F.4) em (F.3) temos:

$$H \sum_{n,m,p} A_{n,m,p} |\psi_{n,m,p}\rangle = E \sum_{n,m,p} A_{n,m,p} |\psi_{n,m,p}\rangle \quad (\text{F.5})$$

Aplicando $\langle\psi|$, escrito na base dos $|\psi_{n,m,p}\rangle$, nos dois lados de (F.5) temos:

$$\left[\sum_{n',m',p'} A_{n',m',p'}^* \langle\psi_{n',m',p'}| \right] H \left[\sum_{n,m,p} A_{n,m,p} |\psi_{n,m,p}\rangle \right] = \left[\sum_{n',m',p'} A_{n',m',p'}^* \langle\psi_{n',m',p'}| \right] E \left[\sum_{n,m,p} A_{n,m,p} |\psi_{n,m,p}\rangle \right] \quad (\text{F.6})$$

Reescrevendo (5) :

$$\sum_{\substack{n', m', p' \\ n, m, p}} A_{n',m',p'}^* A_{n,m,p} \langle\psi_{n',m',p'}| H |\psi_{n,m,p}\rangle - A_{n',m',p'}^* A_{n,m,p} \langle\psi_{n',m',p'}| E |\psi_{n,m,p}\rangle = 0 \quad (\text{F.7})$$

Fazendo $\frac{\partial(6)}{\partial A_{n',m',p'}}^*$ e igualando a zero, temos:

$$\sum_{n,m,p} A_{n,m,p} \langle\psi_{n',m',p'}| H |\psi_{n,m,p}\rangle = \sum_{n,m,p} E A_{n,m,p} \langle\psi_{n',m',p'}| \psi_{n,m,p}\rangle \quad (\text{F.8})$$

como sabemos, $\langle\psi_{n',m',p'}| \psi_{n,m,p}\rangle = \delta_{n',n} \delta_{m',m} \delta_{p',p}$, de forma que a equação (7) fica:

$$\sum_{n,m,p} A_{n,m,p} \langle\psi_{n',m',p'}| H |\psi_{n,m,p}\rangle = E A_{n',m',p'} \quad (\text{F.9})$$

Cada multiplicador de Lagrange pode ser identificado com a energia do estado.

Ou seja, temos um conjunto de $n \times p \times m$ equações acopladas (no apêndice G vamos mostrar que não há mistura de orbitais, de forma que, na realidade só temos $n \times p$ equações):

$$\begin{aligned} A_{1,1,1} \langle\psi_{1,1,1}| H |\psi_{1,1,1}\rangle + A_{2,1,1} \langle\psi_{1,1,1}| H |\psi_{2,1,1}\rangle \dots A_{n,m,p} \langle\psi_{1,1,1}| H |\psi_{n,m,p}\rangle &= E A_{1,1,1} \\ A_{1,1,1} \langle\psi_{2,1,1}| H |\psi_{1,1,1}\rangle + A_{2,1,1} \langle\psi_{2,1,1}| H |\psi_{2,1,1}\rangle \dots A_{n,m,p} \langle\psi_{2,1,1}| H |\psi_{n,m,p}\rangle &= E A_{2,1,1} \\ \vdots & \vdots \\ A_{1,1,1} \langle\psi_{n,m,p}| H |\psi_{1,1,1}\rangle + A_{2,1,1} \langle\psi_{n,m,p}| H |\psi_{2,1,1}\rangle \dots A_{n,m,p} \langle\psi_{n,m,p}| H |\psi_{n,m,p}\rangle &= E A_{n,m,p} \end{aligned}$$

Esse conjunto de equações pode ser escrito na forma matricial:

$$\widetilde{H} \cdot \vec{A} = E \cdot \vec{A} \quad (\text{F.10})$$

onde os elementos de \widetilde{H} são: $\langle \psi_{n,m,p} | H | \psi_{n,m,p} \rangle$. Dessa forma então, demonstramos que encontrar os $A_{n,m,p}$ que minimizem a energia é o mesmo que resolver a equação (F.10).

Apêndice G

Cálculo dos Elementos de Matriz do Hamiltoniano do QD

Cálculo do elementos de matriz.

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n,m,p} | H | \psi_{n,m,p} \rangle &= \langle \psi_{n,m,p} | H_z | \psi_{n,m,p} \rangle + \langle \psi_{n,m,p} | H_{xy} | \psi_{n,m,p} \rangle + \\ &\langle \psi_{n,m,p} | V | \psi_{n,m,p} \rangle \end{aligned} \quad (\text{G.1})$$

onde $H_z = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, sendo, portando, um operador que só atua em z ; $H_{xy} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$, que é um operador que atua nas coordenadas ρ e φ .

Calculando cada termo:

$$\langle \psi_{n,m,p} | H_z | \psi_{n,m,p} \rangle = \langle \phi_{n,m} | \phi_{n,m} \rangle \cdot \langle \chi_p | H_z | \chi_p \rangle \quad (\text{G.2})$$

Mas $\langle \phi_{n,m} | \phi_{n,m} \rangle = \delta_{n,n} \cdot \delta_{m,m}$ e $H_z | \chi_p \rangle = E_z | \chi_p \rangle$ (ver apêndice E)

De modo que:

$$\langle \chi_p | H_z | \chi_p \rangle = E_z \langle \chi_p | \chi_p \rangle = E_z \delta_{p,p} \quad (\text{G.3})$$

$$\langle \psi_{n,m,p} | H_z | \psi_{n,m,p} \rangle = E_z \delta_{n,n} \cdot \delta_{m,m} \cdot \delta_{p,p} \quad (\text{G.4})$$

onde E_z é dado no apêndice E

Agora vamos calcular o segundo termo:

$$\langle \psi_{n,m,p} | H_{xy} | \psi_{n,m,p} \rangle = \langle \chi_p | \chi_p \rangle \cdot \langle \phi_{n,m} | H_{xy} | \phi_{n,m} \rangle \quad (\text{G.5})$$

Mas $\langle \chi_p | \chi_p \rangle = \delta_{p,p}$ e $H_{xy} | \phi_{n,m} \rangle = E_{xy} | \phi_{n,m} \rangle$

De modo que:

$$\langle \phi_{n,m} | H_{xy} | \phi_{n,m} \rangle = E_{xy} \langle \phi_{n,m} | \phi_{n,m} \rangle = E_{xy} \delta_{n,n} \delta_{m,m} \quad (\text{G.6})$$

$$\langle \psi_{n,m,p} | H_{xy} | \psi_{n,m,p} \rangle = E_{xy} \delta_{n,n} \delta_{m,m} \delta_{p,p} \quad (\text{G.7})$$

O último termo que temos que calcular é:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n,m,p} | V | \psi_{n,m,p} \rangle &= -\langle \psi_{n,m,p} | V_{B1} Y \left(\frac{L}{2} - z \right) | \psi_{n,m,p} \rangle \\ &- \langle \psi_{n,m,p} | V_{B2} Y \left(r_0^2 - \rho^2 - (z - z_0)^2 \right) Y \left(z - \frac{L}{2} \right) | \psi_{n,m,p} \rangle \\ &+ \langle \psi_{n,m,p} | V_{B2} Y \left(z - \frac{L}{2} \right) | \psi_{n,m,p} \rangle + \langle \psi_{n,m,p} | V_{wl} Y \left(\frac{L^2}{4} - z^2 \right) | \psi_{n,m,p} \rangle \end{aligned} \quad (\text{G.8})$$

Vamos resolver cada um dos termos separadamente:

O primeiro, o terceiro e o quarto termo são simples pois os operadores de potencial só atuam na coordenada z , de forma que temos:

$$\langle \psi_{n,m,p} | V_{wl} Y \left(\frac{L^2}{4} - z^2 \right) | \psi_{n,m,p} \rangle = \langle \phi_{n,m} | \phi_{n,m} \rangle \cdot \langle \chi_p | V_{wl} Y \left(\frac{L^2}{4} - z^2 \right) | \chi_p \rangle \quad (\text{G.9})$$

Como já dissemos $\langle \phi_{n,m} | \phi_{n,m} \rangle = \delta_{n,n} \delta_{m,m}$.

Então:

$$\langle \psi_{n,m,p} | V_{wl} Y \left(\frac{L^2}{4} - z^2 \right) | \psi_{n,m,p} \rangle = \delta_{n,n} \delta_{m,m} V_{wl} \int_{-\frac{L}{2}}^{-\frac{L}{2}} dz \frac{2}{L} \cos \left(\frac{p\pi z}{D} \right) \cos \left(\frac{p'\pi z}{D} \right) \quad (\text{G.10})$$

se $p = 0, 2, 4 \dots$

Ou:

$$\langle \psi_{n,m,p} | V_{wl} Y \left(\frac{L^2}{4} - z^2 \right) | \psi_{n',m',p'} \rangle = \delta_{n,n'} \delta_{m,m'} V_{wl} \int_{-\frac{L}{2}}^{-\frac{L}{2}} dz \frac{2}{L} \sin \left(\frac{p\pi z}{D} \right) \sin \left(\frac{p'\pi z}{D} \right) \quad (\text{G.11})$$

se $p = 1, 3, 5$

Para o terceiro termo temos:

$$\langle \psi_{n,m,p} | V_{B2} Y \left(z - \frac{L}{2} \right) | \psi_{n',m',p'} \rangle = \langle \phi_{n,m} | \phi_{n',m'} \rangle \cdot \langle \chi_p | V_{B2} Y \left(z - \frac{L}{2} \right) | \chi_{p'} \rangle \quad (\text{G.12})$$

Então temos:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n,m,p} | V_{B2} Y \left(z - \frac{L}{2} \right) | \psi_{n',m',p'} \rangle = \\ + \delta_{n,n'} \delta_{m,m'} V_{B2} \int_{\frac{L}{2}}^{\frac{D}{2}} dz \frac{2}{L} \cos \left(\frac{p\pi z}{D} \right) \cos \left(\frac{p'\pi z}{D} \right) \end{aligned} \quad (\text{G.13})$$

se $p = 0, 2, 4, \dots$

Ou:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n,m,p} | V_{B2} Y \left(z - \frac{L}{2} \right) | \psi_{n',m',p'} \rangle = \\ \delta_{n,n'} \delta_{m,m'} V_{B2} \int_{\frac{L}{2}}^{\frac{D}{2}} dz \frac{2}{L} \sin \left(\frac{p\pi z}{D} \right) \sin \left(\frac{p'\pi z}{D} \right) \end{aligned} \quad (\text{G.14})$$

se $p = 1, 3, 5, \dots$

O primeiro termo é resolvido de forma análoga ao terceiro:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n,m,p} | V_{B1} Y \left(-z + \frac{L}{2} \right) | \psi_{n',m',p'} \rangle = \\ + \delta_{n,n'} \delta_{m,m'} V_{B1} \int_{-\frac{D}{2}}^{-\frac{L}{2}} dz \frac{2}{L} \cos \left(\frac{p\pi z}{D} \right) \cos \left(\frac{p'\pi z}{D} \right) \end{aligned} \quad (\text{G.15})$$

se $p = 0, 2, 4, \dots$

Ou

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n,m,p} | V_{B1} Y \left(-z + \frac{L}{2} \right) | \psi_{n',m',p'} \rangle = \\ \delta_{n,n'} \delta_{m,m'} V_{B1} \int_{-\frac{D}{2}}^{-\frac{L}{2}} dz \frac{2}{L} \sin \left(\frac{p\pi z}{D} \right) \sin \left(\frac{p'\pi z}{D} \right) \end{aligned} \quad (\text{G.16})$$

se $p = 1, 3, 5...$

O segundo termo só não envolve a variável φ , de modo que pode escrito como:

$$\begin{aligned} & \langle \psi_{n,m,p} | V_{B2} Y(r_0^2 - \rho^2 - (z - z_0)^2) Y\left(z - \frac{L}{2}\right) | \psi_{n,m,p'} \rangle = \\ & \delta_{m,m} V_{B2} \int_0^R d\rho \cdot \rho \cdot N_{nm} N_{n,m} J_m(\alpha_{nm}\rho) J_m(\alpha_{n,m}\rho) \times \int_{-\frac{D}{2}}^{\frac{D}{2}} dz \cdot \frac{2}{L} \cos\left(\frac{p\pi z}{D}\right) \cos\left(\frac{p'\pi z}{D}\right) \\ & Y\left(z - \frac{L}{2}\right) Y(r_0^2 - \rho^2 - (z - z_0)^2) \end{aligned} \quad (G.17)$$

Se $p = 0, 2, 4...$

Ou:

$$\begin{aligned} & \langle \psi_{n,m,p} | V_{B2} Y(r_0^2 - \rho^2 - (z - z_0)^2) Y\left(z - \frac{L}{2}\right) | \psi_{n,m,p'} \rangle = \\ & \delta_{m,m} V_{B2} \int_0^R d\rho \cdot \rho \cdot N_{nm} N_{n,m} J_m(\alpha_{nm}\rho) J_m(\alpha_{n,m}\rho) \times \int_{-\frac{D}{2}}^{\frac{D}{2}} dz \cdot \frac{2}{L} \sin\left(\frac{p\pi z}{D}\right) \sin\left(\frac{p'\pi z}{D}\right) \\ & Y\left(z - \frac{L}{2}\right) Y(r_0^2 - \rho^2 - (z - z_0)^2) \end{aligned} \quad (G.18)$$

se $p = 1, 3, 5...$

As integrais em z podem ser resolvidas exatamente:

Se $p = 0, 2, 4...$, a integral que temos que resolver é a seguinte:

$$\int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0} dz \cos\left(\frac{p\pi z}{D}\right) \cos\left(\frac{p'\pi z}{D}\right) \quad (G.19)$$

Se $p = p'$ a equação (G.19) fica:

$$\int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0} dz \cos^2\left(\frac{p\pi z}{D}\right) \quad (G.20)$$

Fazendo a mudança de variável $y \equiv \frac{p\pi z}{D}$, a equação (G.20) é escrita como:

$$\frac{D}{p\pi} \int dy \cos^2(y) \quad (G.21)$$

Mas, sabemos que:

$$\cos(2a) = 2 \cos^2(a) - 1 \Rightarrow \cos^2(a) = \frac{\cos(2a)}{2} + \frac{1}{2} \quad (G.22)$$

De modo que:

$$\frac{D}{p\pi} \int dy \cos^2(y) = \frac{D}{p\pi} \left[\frac{1}{2} \int \cos(2y) dy - \frac{1}{2} \int dy \right] = \frac{1}{4} \sin(2y) - \frac{y}{2} \quad (\text{G.23})$$

Dessa forma que, para $p = p'$:

$$\int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0} dz \cos^2\left(\frac{p\pi z}{D}\right) = \frac{D}{4p\pi} \left[\sin\left(2\frac{p\pi\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0}{D}\right) - \sin\left(\frac{p\pi L}{D}\right) \right] - \frac{\left(\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0\right)}{2} - \frac{L}{4} \quad (\text{G.24})$$

Resolvendo (G.19) para $p \neq p'$:

Sabemos que:

$$\cos\left(\frac{p\pi z}{D} + \frac{p'\pi z}{D}\right) = \cos\left(\frac{p\pi z}{D}\right) \cos\left(\frac{p'\pi z}{D}\right) + \sin\left(\frac{p\pi z}{D}\right) \sin\left(\frac{p'\pi z}{D}\right) \quad (\text{G.25})$$

e que:

$$\cos\left(\frac{p\pi z}{D} - \frac{p'\pi z}{D}\right) = \cos\left(\frac{p\pi z}{D}\right) \cos\left(\frac{p'\pi z}{D}\right) - \sin\left(\frac{p\pi z}{D}\right) \sin\left(\frac{p'\pi z}{D}\right) \quad (\text{G.26})$$

Usando (G.25) e (G.26), podemos escrever:

$$\cos\left(\frac{p\pi z}{D}\right) \cos\left(\frac{p'\pi z}{D}\right) = \frac{1}{2} \left[\cos\left(\frac{\pi z}{D}(p+p')\right) + \cos\left(\frac{\pi z}{D}(p-p')\right) \right] \quad (\text{G.27})$$

Logo:

$$\int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0} dz \cos\left(\frac{p\pi z}{D}\right) \cos\left(\frac{p'\pi z}{D}\right) = \frac{1}{2} \int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0} dz \cos\left(\frac{\pi z}{D}(p+p')\right) + \frac{1}{2} \int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0} dz \cos\left(\frac{\pi z}{D}(p-p')\right) \quad (\text{G.28})$$

Para a primeira integral de (G.28), fazemos a mudança de variável $x \equiv \frac{\pi z}{D}(p+p')$ e na segunda integral, a mudança de variável é: $y \equiv \frac{\pi z}{D}(p-p')$. Com isso, (G.28) é escrita como:

$$\frac{D}{\pi(p+p')} \int_{\frac{L\pi(p+p')}{2D}}^{\frac{\pi(p+p')}{D}(\sqrt{r_0^2-\rho^2+z_0})} dx \cos(x) +$$

$$\frac{D}{\pi(p-p')} \int_{\frac{L\pi(p-p')}{2D}}^{\frac{\pi(p-p')}{D}(\sqrt{r_0^2-\rho^2+z_0})} dy \cos(y) = \quad (G.29)$$

$$= \frac{D}{\pi(p+p')} \left[\sin \left(\frac{\pi(p+p')}{D} (\sqrt{r_0^2-\rho^2+z_0}) \right) \right] -$$

$$\frac{D}{\pi(p+p')} \left[\sin \left(\frac{L\pi(p+p')}{2D} \right) \right] + \frac{D}{\pi(p-p')} \left[\sin \left(\frac{\pi(p-p')}{D} (\sqrt{r_0^2-\rho^2+z_0}) \right) \right]$$

$$- \frac{D}{\pi(p-p')} \left[\sin \left(\frac{L\pi(p-p')}{2D} \right) \right] \quad (G.30)$$

Agora, se $p = 1, 3, 5, \dots$ a integral que temos que resolver é:

$$\int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2-\rho^2+z_0}} dz \sin \left(\frac{p\pi z}{D} \right) \sin \left(\frac{p'\pi z}{D} \right) \quad (G.31)$$

Se $p = p'$, a integral (G.31) é escrita como:

$$\int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2-\rho^2+z_0}} dz \sin^2 \left(\frac{p\pi z}{D} \right) \quad (G.32)$$

Fazendo a seguinte mudança de variável $y \equiv \frac{p\pi z}{D}$, escrevemos (G.32) como:

$$\frac{D}{p\pi} \int dy \sin^2(y) \quad (G.33)$$

Mas, sabemos que:

$$\cos(2a) = 1 - 2\sin^2(a) \Rightarrow \sin^2(a) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos(2a) \quad (G.34)$$

Dessa forma, a equação (G.33) pode ser escrita como:

$$\frac{1D}{2p\pi} \int dy - \frac{D}{2p\pi} \int dy \sin(2y) = \frac{Dy}{2p\pi} + \frac{D}{4p\pi} \cos(2y) \quad (G.35)$$

De modo que:

$$\int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0} dz \sin^2 \left(\frac{p\pi z}{D} \right) = \frac{\left(\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0 \right) - \frac{L}{4} + \frac{D}{4p\pi} \left[\sin \left(\frac{2p\pi \left(\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0 \right)}{D} \right) - \sin \left(\frac{p\pi L}{D} \right) \right]}{2} \quad (\text{G.36})$$

Para $p \neq p'$, usamos (G.25) e (G.26) para dizer que:

$$\sin \left(\frac{p\pi z}{D} \right) \sin \left(\frac{p'\pi z}{D} \right) = \cos \left(\frac{p\pi z}{D} + \frac{p'\pi z}{D} \right) - \cos \left(\frac{p\pi z}{D} - \frac{p'\pi z}{D} \right) \quad (\text{G.37})$$

De forma que aplicando (G.37) em (G.31) temos:

$$\int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0} dz \sin \left(\frac{p\pi z}{D} \right) \sin \left(\frac{p'\pi z}{D} \right) = \frac{1}{2} \int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0} dz \cos \left(\frac{\pi z}{D} (p + p') \right) - \frac{1}{2} \int_{\frac{L}{2}}^{\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0} dz \cos \left(\frac{\pi z}{D} (p - p') \right) \quad (\text{G.38})$$

Já resolvemos essas integrais, assim, temos:

$$\begin{aligned} &= \frac{D}{\pi(p + p')} \left[\sin \left(\frac{\pi(p + p')}{D} \left(\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0 \right) \right) \right] - \frac{D}{\pi(p + p')} \left[\sin \left(\frac{L\pi(p + p')}{2D} \right) \right] \\ &- \frac{D}{\pi(p - p')} \left[\sin \left(\frac{\pi(p - p')}{D} \left(\sqrt{r_0^2 - \rho^2} + z_0 \right) \right) \right] + \frac{D}{\pi(p - p')} \left[\sin \left(\frac{L\pi(p - p')}{2D} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{G.39})$$

Agora só resta a integral em ρ , que pode ser resolvida por quadratura gaussiana.

Temos assim o cálculo dos elementos de matriz completo.

Apêndice H

Cálculo do Potencial Devido à Placa que Simula os QDs

Nesse apêndice vamos calcular o potencial da placa que simula os QDs.

O campo elétrico dessa placa é escrito como (lei de Gauss):

Para $z < \bar{z}$, o campo é zero, pois não há cargas envolvidas

Para $z > \bar{z}$, o campo é dado por:

$$E_{dot} = \frac{4\pi\sigma_{dot}}{\kappa} e \quad (\text{H.1})$$

onde \bar{z} é a posição da placa.

De forma que podemos escrever (H.1) da seguinte forma:

$$E_{dot}(z) = \frac{4\pi\sigma_{dot}}{\kappa} eY(z - \bar{z}) \quad (\text{H.2})$$

O campo elétrico $\Phi_{dot}(z)$ é dado por:

Para $z < \bar{z}$:

$$\Phi_{dot}(z) = A \quad (\text{H.3})$$

Para $z > \bar{z}$:

$$\Phi_{dot}(z) = \int dz E_{dot}(z) = e \frac{4\pi\sigma_{dot}}{\kappa} z + A' \quad (\text{H.4})$$

Tenho liberdade de escolher A , pois o que importa no problema são as diferenças de potencial. Por conveniência, escolhemos que o campo seja zero para $z < \bar{z}$,

então, $A = 0$. A' é determinado impondo que o campo deve ser contínuo em todo o domínio. Para isso, $\Phi_{dot}(z) = 0$. Logo:

$$\Phi_{dot}(z) = e^{\frac{4\pi\sigma_{dot}}{\kappa}(z - \bar{z})} \quad (H.5)$$

Apêndice I

A Equação de Schrödinger Efetiva na Direção de Crescimento para o Elétron em um QD

$$\langle \alpha | H_e | \alpha \rangle = \langle \alpha | E_e | \alpha \rangle \quad (I.1)$$

$$H_e = \frac{P_e^2}{2m_e^*} + V(\rho_e, z_e, \varphi_e) \quad (I.2)$$

onde $V(\rho_e, z_e, \varphi_e) = V_e Y \left[z_e^2 - \frac{L^2}{4} \right] - V_e Y [\tau_0^2 - \rho_e^2 - (z - z_0)^2]$ e $P_e = i\hbar \nabla$
Podemos escrever (I.2) da seguinte forma:

$$H_e = T_z + T_{\perp} + V(\rho_e, z_e, \varphi_e) \quad (I.3)$$

onde, $T_z = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2}$ e $T_{\perp} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_{\perp}^2$

Aplicando (I.3) em (I.1) temos:

$$\langle \alpha | T_z | \alpha \rangle + \langle \alpha | T_{\perp} | \alpha \rangle + \langle \alpha | V(\rho_e, z_e, \varphi_e) | \alpha \rangle = \langle \alpha | E_e | \alpha \rangle \quad (I.4)$$

Escrevendo $|\alpha\rangle = |g\rangle \otimes |f\rangle$, onde $\langle \vec{r}_e | \alpha \rangle = g(\rho_e, \varphi_e) f(z_e)$. Como T_z é um operador que só atua em z_e e T_{\perp} é um operador que só atua em ρ_e e em φ_e , podemos escrever (I.4) como:

$$\langle g | g \rangle \langle f | T_z | f \rangle + \langle g | T_{\perp} | g \rangle \langle f | f \rangle + \langle f | \otimes \langle g | V(\rho_e, z_e, \varphi_e) | g \rangle \otimes | f \rangle =$$

$$E_e \langle f|f \rangle \langle g|g \rangle \quad (I.5)$$

Aplicando $|z\rangle$ em ambos os lados de (I.5), fazendo a derivada funcional com respeito à $f^*(z)$ e usando a condição de normalização $\langle g|g \rangle$, temos:

$$T_z|f\rangle = \langle g|T_\perp|g\rangle|f\rangle + \langle g|V(\rho_e, z_e, \varphi_e)|g\rangle|f\rangle = E_e|f\rangle \quad (I.6)$$

Para simplificar a notação, vamos chamar $\langle g|T_\perp|g\rangle = \bar{T}_\perp(\lambda)$ e $\langle g|V(\rho_e, z_e, \varphi_e)|g\rangle = \bar{V}(z_e, \lambda)$

De modo que a equação (I.6) é escrita como:

$$T_z|f\rangle + \bar{T}_\perp(\lambda)|f\rangle + \bar{V}(z_e, \lambda)|f\rangle \quad (I.7)$$

Apêndice J

Cálculo dos Termos da Equação de Schrödinger do Elétron em um QD

Nesse apêndice vamos calcular $\bar{T}_\perp(\lambda)$ e $\bar{V}(z, \lambda)$.

$$\bar{T}_\perp|g\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m_c^*} \nabla_\perp^2 g(\rho) \quad (\text{J.1})$$

onde $g(\rho) = N_\lambda e^{-\frac{\rho^2}{\lambda^2}}$, com N_λ sendo a constante de normalização. Vamos calcular N_λ .

$$N_\lambda^2 2\pi \int_0^\infty d\rho \rho e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} = 1 \quad (\text{J.2})$$

Fazendo a mudança de variável $y \equiv \frac{2\rho^2}{\lambda^2}$. Assim, a equação (J.2) é escrita como:

$$\frac{\lambda^2}{2} \pi N_\lambda^2 \int_0^\infty dy e^{-y} = 1 \Rightarrow N_\lambda = \sqrt{\frac{2}{\pi} \frac{1}{\lambda}} \quad (\text{J.3})$$

Escrevendo ∇_\perp em coordenadas cilíndricas:

$$\nabla_\perp^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (\text{J.4})$$

Calculando cada termo separadamente:

$$\frac{\partial g(\rho)}{\partial \rho} = -N_\lambda \frac{2\rho}{\lambda^2} e^{-\frac{\rho^2}{\lambda^2}} \quad (\text{J.5})$$

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial g(\rho)}{\partial \rho} \right) = -\frac{4N_\lambda}{\lambda^2} e^{-\frac{\rho^2}{\lambda^2}} \left[\rho - \frac{\rho^2}{\lambda^2} \right] \quad (\text{J.6})$$

De modo que :

$$T_{\perp}|g\rangle = \frac{\hbar^2}{2m_c^*} \frac{4N_{\lambda}}{\lambda^2} e^{-\frac{\rho^2}{\lambda^2}} \left[1 - \frac{\rho^2}{\lambda^2} \right] \quad (\text{J.7})$$

$$\langle g|T_{\perp}|g\rangle = \frac{\hbar^2}{2m_c^*} \frac{4N_{\lambda}^2}{\lambda^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} d\rho \rho e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} \left[1 - \frac{\rho^2}{\lambda^2} \right] \quad (\text{J.8})$$

Resolvendo cada uma das partes da integral:

$$2\pi N_{\lambda}^2 \frac{\hbar^2}{2m_c^*} \frac{4}{\lambda^2} \int_0^{\infty} d\rho \rho e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} \quad (\text{J.9})$$

Mas temos que:

$$\int_0^{\infty} d\rho \rho e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} = \frac{1}{N_{\lambda}^2 2\pi} \quad (\text{J.10})$$

De modo que a equação (J.9) fica:

$$\frac{2\hbar^2}{m_c^* \lambda^2} \quad (\text{J.11})$$

A outra integral é:

$$2\pi N_{\lambda}^2 \frac{\hbar^2}{2m_c^*} \frac{4}{\lambda^4} \int_0^{\infty} d\rho \rho^3 e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} \quad (\text{J.12})$$

Integrando por partes:

$$\int_0^{\infty} d\rho \rho^3 e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} = \frac{\lambda^4}{8} \quad (\text{J.13})$$

E então a equação (J.12) fica:

$$\frac{\hbar^2}{m_c^* \lambda^2} \quad (\text{J.14})$$

E assim, calculamos $\bar{T}_{\perp}(\lambda)$:

$$\bar{T}_{\perp}(\lambda) = \langle g|T_{\perp}|g\rangle = \frac{\hbar^2}{m_c^* \lambda^2} \quad (\text{J.15})$$

Agora vamos calcular $\bar{V}(z, \lambda)$

$$\bar{V}(z, \lambda) = \langle g|V(\rho, z, \varphi)|g\rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} d\rho \rho N_{\lambda}^2 e^{\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} V(\rho, z, \varphi) \quad (\text{J.16})$$

$$= N_\lambda^2 2\pi \int_0^\infty d\rho \rho e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} \times$$

$$\left[V_e Y \left[z^2 - \frac{L^2}{4} \right] - V_e Y \left[z - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - \rho^2 - (z - z_0)^2 \right] \right] \quad (\text{J.17})$$

Resolvendo cada uma das integrais separadamente:

$$\begin{aligned} N_\lambda^2 2\pi \int_0^\infty d\rho \rho e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} V_e Y \left[z^2 - \frac{L^2}{4} \right] &= N_\lambda^2 2\pi V_e Y \left[z^2 - \frac{L^2}{4} \right] \int_0^\infty d\rho \rho e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} \\ &= V_e Y \left[z^2 - \frac{L^2}{4} \right] \end{aligned} \quad (\text{J.18})$$

Agora vamos calcular o outro termo:

$$N_\lambda^2 2\pi \int_0^\infty d\rho \rho e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} V_e Y \left[z - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - \rho^2 - (z - z_0)^2 \right] \quad (\text{J.19})$$

$$= N_\lambda^2 2\pi V_e Y \left[z - \frac{L}{2} \right] \int_0^{\sqrt{r_0^2 - (z - z_0)^2}} d\rho \rho e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} \quad (\text{J.20})$$

Fazendo a mudança de variável $y \equiv \frac{2\rho^2}{\lambda^2}$, reescrevemos (J.20) como:

$$\begin{aligned} N_\lambda^2 \frac{\pi}{2} V_e Y \left[z - \frac{L}{2} \right] \int_0^{\frac{\lambda^2}{2} [r_0^2 - (z - z_0)^2]} e^{-y} dy \\ = V_b Y \left[z - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - (z - z_0)^2 \right] \left[1 - e^{-\frac{\lambda^2}{2} [r_0^2 - (z - z_0)^2]} \right] \end{aligned} \quad (\text{J.21})$$

Onde o termo $Y [r_0^2 - (z - z_0)^2]$ foi colocado para garantir que o limite superior da integral seja positivo.

E dessa forma, determinamos $V(z, \lambda)$:

$$V(z, \lambda) = V_e Y \left[z^2 - \frac{L^2}{4} \right] - V_b Y \left[z - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - (z - z_0)^2 \right] \left[1 - e^{-\frac{\lambda^2}{2} [r_0^2 - (z - z_0)^2]} \right] \quad (\text{J.22})$$

Apêndice K

Solução da Equação de Schrödinger Efetiva do Elétron em um QD

Nesse apêndice, vamos resolver a seguinte equação diferencial:

$$\frac{d^2 f(z)}{dz^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - T_{\perp}(\lambda) - V(z, \lambda)] f(z) \quad (\text{K.1})$$

onde $\bar{T}_{\perp}(\lambda) = \frac{\hbar^2}{m\lambda^2}$ e $\bar{V}(z, \lambda)$ é dado por (ver apêndice J):

$$\bar{V}(z, \lambda) = V_e Y \left[z^2 - \frac{L^2}{4} \right] - V_e Y \left[z - \frac{L}{2} \right] Y \left[r_0^2 - (z - z_0)^2 \right] \left[1 - e^{-\frac{2}{\lambda^2} [r_0^2 - (z - z_0)^2]} \right] \quad (\text{K.2})$$

Para resolver (K.1), vamos separar em a solução por partes:

Região I: $z < -\frac{L}{2}$.

Para essa região, $\bar{V}(z, \lambda) = V_e$, então (K.1) fica:

$$\frac{d^2 f_I(z)}{dz^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [-E + \bar{T}_{\perp}(\lambda) + V_e] f_I(z) \quad (\text{K.3})$$

Então:

$$f_I(z) = A e^{k_I(z + \frac{L}{2})} + A' e^{-k_I(z + \frac{L}{2})} \quad (\text{K.4})$$

Onde, A e A' são constantes de normalização e $k_I = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [-E + \bar{T}_\perp(\lambda) + V_e]}$. Mas para $f_I(z)$ ter sentido físico deve ser normalizável e para isso acontecer, A' deve ser zero.

Região II: $-\frac{l}{2} < z < \frac{l}{2}$

Para essa região, $\bar{V}(z, \lambda) = 0$, então a (K.1) fica:

$$\frac{d^2 f_{II}(z)}{dz^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - \bar{T}_\perp(\lambda)] f_{II}(z) \quad (\text{K.5})$$

Então:

$$f_{II}(z) = B \cos(k_{II}z) + C \sin(k_{II}z) \quad (\text{K.6})$$

Onde B e C são constantes de normalização e $k_{II} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [E - \bar{T}_\perp(\lambda)]}$

Região III: $\frac{l}{2} < z < r_0 + z_0$

Nessa região, $\bar{V}(z, \lambda) = V_e e^{-\frac{2}{\lambda^2} [r_0^2 - (z-z_0)^2]}$, dessa forma a equação (K.1) fica:

$$\frac{d^2 f_{III}(z)}{dz^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V_e e^{-\frac{2}{\lambda^2} [r_0^2 - (z-z_0)^2]} - E + \bar{T}_\perp(\lambda)] f_{III}(z) \quad (\text{K.7})$$

Essa equação não tem solução analítica e teremos que resolvê-la numericamente. Voltaremos à esse ponto mais tarde para detalhar a solução.

Região IV: $z > r_0 + z_0$

Nessa região, $\bar{V}(z, \lambda) = V_e$, por isso, a equação (K.1) fica:

$$\frac{d^2 f_{IV}(z)}{dz^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [-E + \bar{T}_\perp(\lambda) + V_e] f_{IV}(z) \quad (\text{K.8})$$

Então:

$$f_{IV}(z) = D' e^{k_I(z-r_0-z_0)} + D e^{-k_I(z-r_0-z_0)}$$

Onde D e D' são constantes de normalização. Mas $f_{IV}(z)$ deve ser normalizável, para ter sentido físico, assim sendo, $D' = 0$.

As condições de contorno são: $f(z)$ e sua derivada com respeito à z , $f'(z)$, devem ser contínuas em todo o domínio. Todas as funções (f_I , f_{II} , f_{IV}) e suas derivadas

são funções contínuas em todo o domínio de seus respectivos intervalos, a não ser nos extremos dos intervalos, onde teremos que impor a continuidade. Assim:

$$f_I \left(-\frac{L}{2} \right) = f_{II} \left(-\frac{L}{2} \right) \quad (\text{K.9})$$

$$f'_I \left(-\frac{L}{2} \right) = f'_{II} \left(-\frac{L}{2} \right) \quad (\text{K.10})$$

As equações (K.9) e (K.10) nos dão o seguinte sistema:

$$A = B \cos \left(k_{II} \frac{L}{2} \right) - C \sin \left(k_{II} \frac{L}{2} \right) \quad (\text{K.11})$$

$$k_I A = k_{II} B \cos \left(k_{II} \frac{L}{2} \right) + k_{II} C \sin \left(k_{II} \frac{L}{2} \right) \quad (\text{K.12})$$

Fazendo (K.11) $\times k_{II} \cos \left(k_{II} \frac{L}{2} \right) + (\text{K.12}) \times \sin \left(k_{II} \frac{L}{2} \right)$, temos:

$$B = A \left[\cos \left(k_{II} \frac{L}{2} \right) + \frac{k_I}{k_{II}} \sin \left(k_{II} \frac{L}{2} \right) \right] \quad (\text{K.13})$$

E fazendo (K.11) $\times k_{II} \sin \left(k_{II} \frac{L}{2} \right) - (\text{K.12}) \times k_{II} \cos \left(k_{II} \frac{L}{2} \right)$, temos:

$$C = A \left[\frac{k_I}{k_{II}} \cos \left(k_{II} \frac{L}{2} \right) - \sin \left(k_{II} \frac{L}{2} \right) \right] \quad (\text{K.14})$$

Assim, garantimos a continuidade da função de onda e da sua derivada nas regiões *I* e *II*.

Agora temos que determinar $f_{III}(z)$ e, para isso, usaremos Runge-Kutta de quarta ordem. A primeira coisa a fazer é transformar (K.7), que é uma equação diferencial de segunda ordem, num conjunto de 2 equações diferenciais de primeira ordem; dessa forma:

$$\begin{cases} f_{III}(z) = w \\ w' = \frac{2m}{\hbar^2} \left[V_e e^{-\frac{2}{\hbar^2} [\tau_0^2 - (z-z_0)^2]} - E + T_{\perp}(\lambda) \right] \end{cases} \quad (\text{K.15})$$

Devemos resolver o conjunto de equações (K.15). Com o método de Runge-Kutta podemos resolver equações diferenciais com erros da ordem de Δz^4 , onde $\Delta z = z_{i+1} - z_i$, em que z_i é o ponto do espaço onde a função é calculada. Essas equações são resolvida pelas seguintes expressões:[21]

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6} [k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4] \quad (\text{K.16})$$

$$w_{i+1} = w_i + \frac{1}{6} [c_1 + 2(c_2 + c_3) + c_4] \quad (\text{K.17})$$

com

$$k_1 = w_i \Delta z \quad (\text{K.18})$$

$$c_1 = \frac{2m}{\hbar^2} \left[V_e e^{-\frac{2}{\lambda^2} [r_0^2 - (z_i - z_0)]} - E - T_{\perp}(\lambda) \right] y_i \Delta z \quad (\text{K.19})$$

$$k_2 = \left(w_i + \frac{1}{2} c_1 \right) \Delta z \quad (\text{K.20})$$

$$c_2 = \frac{2m}{\hbar^2} \left[V_e e^{-\frac{2}{\lambda^2} [r_0^2 - (z_i + \frac{1}{2} \Delta z - z_0)]} - E - T_{\perp}(\lambda) \right] \left(y_i + \frac{k_1}{2} \right) \Delta z \quad (\text{K.21})$$

$$k_3 = \left(w_i + \frac{1}{2} c_2 \right) \Delta z \quad (\text{K.22})$$

$$c_3 = \frac{2m}{\hbar^2} \left[V_e e^{-\frac{2}{\lambda^2} [r_0^2 - (z_i + \frac{1}{2} \Delta z - z_0)]} - E - T_{\perp}(\lambda) \right] \left(y_i + \frac{k_2}{2} \right) \Delta z \quad (\text{K.23})$$

$$k_4 = (w_i + c_3) \Delta z \quad (\text{K.24})$$

$$c_4 = \frac{2m}{\hbar^2} \left[V_e e^{-\frac{2}{\lambda^2} [r_0^2 - (z_i + \Delta z - z_0)]} - E - T_{\perp}(\lambda) \right] (y_i + k_3) \Delta z \quad (\text{K.25})$$

Note que a solução ainda depende da energia, a qual nós ainda não conhecemos. Para resolver esse problema, devemos impor as condições de contorno que forçam a função de onda e sua derivada serem contínuas. Runge-Kutta nos dá uma solução contínua em toda região *III*, a menos dos extremos desse intervalo, nesses pontos, devemos impor as condições de contorno. Assim:

$$f_{II} \left(\frac{L}{2} \right) = f_{III} \left(\frac{L}{2} \right) \quad (\text{K.26})$$

$$f'_{II} \left(\frac{L}{2} \right) = f'_{III} \left(\frac{L}{2} \right) \quad (\text{K.27})$$

As equações (K.26) e (K.27) nos dá as condições iniciais de resolver o problema, mais explicitamente:

$$f_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = f_{III}\left(\frac{L}{2}\right) = y_0 \quad (\text{K.28})$$

$$f'_{II}\left(\frac{L}{2}\right) = f'_{III}\left(\frac{L}{2}\right) = w_0 \quad (\text{K.29})$$

A outra condição de contorno a ser obedecida é:

$$f_{III}(r_0 + z_0) = f_{IV}(r_0 + z_0) \quad (\text{K.30})$$

$$f'_{III}(r_0 + z_0) = f'_{IV}(r_0 + z_0) \quad (\text{K.31})$$

Para resolver (K.30) e (K.31) devemos conhecer a constante de normalização D , a qual não conhecemos. Contornamos esse problema comparando a derivada logarítmica:

$$\frac{w_n}{y_n} = \frac{f'_{III}(r_0 + z_0)}{f_{III}(r_0 + z_0)} = \frac{f'_{IV}(r_0 + z_0)}{f_{IV}(r_0 + z_0)} = -k_I \quad (\text{K.32})$$

onde n é número de pontos do espaço nos quais a função de onda foi calculada.

A condição (K.32) só é satisfeita para o valor de E que for autovalor do Hamiltoniano. Então o problema está resolvido quando encontrarmos E que faça (K.32) ser verdadeira, dentro da precisão desejada.

Na prática, partimos de um valor de E inicial e testamos (K.32), se $\left(\frac{w_n}{y_n} + k_I\right) > 10^{-4}$ então fazemos:

$$E = E + \left(\frac{f'_{III}(r_0 + z_0)}{f_{III}(r_0 + z_0)} - \frac{f'_{IV}(r_0 + z_0)}{f_{IV}(r_0 + z_0)} \right) \quad (\text{K.33})$$

até que (K.32) seja satisfeita.

Com isso, determinamos $f(z)$ e calculamos a energia do estado fundamental do elétron no QD. Note que as soluções de (K.1) dependem de λ .

Apêndice L

Cálculo do Potencial Elétrico Sofrido pelo Buraco Devido à Presença do Elétron

Nesse apêndice, vamos calcular $\langle \alpha \left| \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right| \alpha \rangle$.

Sabemos que:

$$\langle \alpha \left| \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right| \alpha \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi_e \int_{-\infty}^{\infty} dz_e |f(z_e)|^2 \int_0^{\infty} d\rho_e \rho_e |\alpha(\vec{r}_e)|^2 \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \quad (\text{L.1})$$

$$= \frac{2}{\pi} \frac{1}{\lambda^2} \int_0^{2\pi} d\varphi_e \int_{-\infty}^{\infty} dz_e |f(z_e)|^2 \int_0^{\infty} d\rho_e \rho_e \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \quad (\text{L.2})$$

Podemos escrever $\frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|}$ como[22]:

$$\frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} =$$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dk e^{im(\varphi_e - \varphi_h)} J_m(k\rho_e) J_m(k\rho_h) e^{k|z_e - z_h|} \quad (\text{L.3})$$

Substituindo (L.3) em (L.2) temos:

$$\begin{aligned} \frac{2}{\pi} \frac{1}{\lambda^2} \int_0^{\infty} dk \int_0^{2\pi} d\varphi_e e^{im(\varphi_e - \varphi_h)} \int_{-\infty}^{\infty} dz_e |f(z_e)|^2 e^{-k|z_e - z_h|} \times \\ \int_0^{\infty} d\rho_e \rho_e e^{-\frac{2\rho^2}{\lambda^2}} J_m(k\rho_e) J_m(k\rho_h) \end{aligned} \quad (\text{L.4})$$

A integral em φ_e é:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi_e e^{im(\varphi_e - \varphi_h)} = 2\pi \delta_{m0} \quad (\text{L.5})$$

Novamente, $\delta_{m,0}$ multiplicar o termo de interação é consequência da simetria cilíndrica, o seu significado físico é que não existe mistura de orbitais (exatamente da mesma forma que no capítulo anterior). Como só temos o estado fundamental ($m = 0$), o único termo da somatória que resta é o termo envolvendo $m = 0$.

Substituindo (L.5) em (L.4) temos[23]:

$$\frac{4}{\lambda^2} \int_0^\infty dk J_0(k\rho_h) \int_{-\infty}^\infty dz_e |f(z_e)|^2 e^{-k|z_e - z_h|} \int_0^\infty d\rho_e \rho_e e^{-\frac{2\rho_e^2}{\lambda^2}} J_0(k\rho_e) \quad (\text{L.6})$$

A última integral de (L.6) é exatamente integrável pois:

$$\int_0^\infty x^\nu e^{-ax^2} J_\nu(\beta x) dx = \frac{\beta}{(2a)^{\nu+1}} e^{-\frac{\beta^2}{4a}} \quad (\text{L.7})$$

De forma que:

$$\int_0^\infty d\rho_e \rho_e e^{-\frac{2\rho_e^2}{\lambda^2}} J_0(k\rho_e) = \frac{\lambda^2}{4} e^{-\frac{k^2\lambda^2}{8}} \quad (\text{L.8})$$

Substituindo (L.8) em (L.6) temos:

$$\langle \alpha \left| \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right| \alpha \rangle = \int_0^\infty dk J_0(k\rho_e) e^{-\frac{k^2\lambda^2}{8}} \int_{-\infty}^\infty dz_e |f(z_e)|^2 e^{-k|z_e - z_h|} \quad (\text{L.9})$$

Apêndice M

Cálculo das Constantes de Normalização das Funções de Onda Variacionais

Nesse apêndice vamos calcular a constante de normalização B da seguinte função de onda:

$$\beta(\vec{r}_h) = B \left[e^{-\frac{(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + e^{-\frac{(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} \right] \quad (\text{M.1})$$

onde λ_2 e λ_3 são parâmetros variacionais.

A normalização é dada por:

$$B^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz_h \left[e^{-\frac{2(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + e^{-\frac{2(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} \right]^2 = 1 \quad (\text{M.2})$$

$$= B^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz_h e^{-\frac{2(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + \int_{-\infty}^{\infty} dz_h e^{-\frac{2(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} +$$

$$B^2 \left[2 \int_{-\infty}^{\infty} dz_h e^{-\frac{[(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2 + (z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2]}{\lambda_2^2}} \right] \quad (\text{M.3})$$

A última integral da equação (M.3) é o termo de interferência. A primeira e a segunda integrais são integrais no intervalo $[-\infty, \infty]$ de gaussianas de mesma

largura, apenas centradas em pontos diferentes, de modo que as duas têm o mesmo valor. Assim, (M.3) pode ser escrita como:

$$2B^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} dz_h e^{-\frac{2(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + \int_{-\infty}^{\infty} dz_h e^{-\frac{[(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2 + (z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2]}{\lambda_2^2}} \right] \quad (M.4)$$

Resolvendo cada uma das integrais separadamente:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz_h e^{-\frac{2(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \lambda_2 \quad (M.5)$$

Onde fizemos a seguinte mudança de variável: $x \equiv \frac{\sqrt{2}}{\lambda_2} (z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)$.

Agora, vamos calcular a outra integral de (M.4):

Com um pouco de álgebra elementar, podemos escrever:

$$(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2 + (z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2 = 2 \left[\left(z_h - \frac{H}{2} \right)^2 + \left(\frac{L}{2} + \lambda_3 \right) \left(\frac{L}{2} + H + \lambda_3 \right) + \frac{3}{4} H^2 \right] \quad (M.6)$$

De modo que a segunda integral de (M.4) é escrita como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz_h e^{-\frac{[(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2 + (z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2]}{\lambda_2^2}} = 2e^{-\frac{2}{\lambda_2^2} [(\frac{L}{2} + \lambda_3)(\frac{L}{2} + \lambda_3 + H) + \frac{3}{4} H^2]} \times$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz_h e^{-\frac{2}{\lambda_2^2} (z_h - \frac{H}{2})^2} \quad (M.7)$$

$$I \equiv e^{-\frac{2}{\lambda_2^2} [(\frac{L}{2} + \lambda_3)(\frac{L}{2} + \lambda_3 + H) + \frac{3}{4} H^2]} \quad (M.8)$$

Note que a distância entre os centros das duas gaussianas é $\frac{L}{2} + \lambda_3 + H$, de modo que quanto mais afastadas os centros das gaussianas estiverem, menor é o termo de interferência.

Voltando à integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz_h e^{-\frac{[(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2 + (z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2]}{\lambda_2^2}} = 2I \int_{-\infty}^{\infty} dz_h e^{-\frac{2}{\lambda_2^2} (z_h - \frac{H}{2})^2} = 2I \sqrt{\frac{\pi}{2}} \lambda_2 \quad (M.9)$$

De forma que:

$$B^2 = \frac{1}{\lambda_2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{2[I+1]} \quad (\text{M.10})$$

Note que se as gaussianas estiverem muito separadas, isto é, $I = 0$, a equação (M.10) fica:

$$B^2 = \frac{1}{\lambda_2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{2} \quad (\text{M.11})$$

que é metade da constante de normalização de uma gaussiana.

Apêndice N

Cálculo do Termo Cinético do Hamiltoniano do Buraco

Nesse apêndice vamos calcular o termo cinético do Hamiltoniano do buraco. Vamos escrever a função de onda como:

$$\beta(\vec{r}_h) = f(\rho_h)g(z_h) \quad (\text{N.1})$$

onde:

$$f(\rho_h) = Ae^{-\frac{\rho_h^2}{\lambda_1^2}} \quad (\text{N.2})$$

$$g(z_h) = g_1(z_h) + g_2(z_h) = B \left[e^{-\frac{(z_h + \frac{z}{2} + \lambda_2)^2}{\lambda_2^2}} + e^{-\frac{(z_h - \frac{z}{2} - \lambda_2)^2}{\lambda_2^2}} \right] \quad (\text{N.3})$$

Primeiro, vamos calcular: $\langle \beta | T_{\rho_h} | \beta \rangle$ Usando a completeza da base $\{\vec{r}_h\}$, podemos escrever $T_{\rho_h} | \beta \rangle$ da seguinte forma, em coordenadas cilíndricas:

$$T_{\perp} | \beta \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m_v^*} \left[\frac{1}{\rho_h} \frac{d}{d\rho_h} \left(\rho_h \frac{d}{d\rho_h} \right) + \frac{1}{\rho_h^2} \frac{d^2}{d\rho_h^2} \right] f(\rho_h)g(z_h) \quad (\text{N.4})$$

$$\frac{1}{\rho_h} \frac{d}{d\rho_h} \left(\rho_h \frac{d}{d\rho_h} \right) f(\rho_h) = f(\rho_h) \left[-\frac{4}{\lambda_1^2} + 4\frac{\rho_h^2}{\lambda_1^4} \right] \quad (\text{N.5})$$

De modo que:

$$\langle \beta | T_{\perp} | \beta \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m_v^*} \int_{-\infty}^{\infty} dz_h g^2(z_h) \int_0^{\infty} d\rho_h \rho_h A^2 e^{-\frac{2\rho_h^2}{\lambda_1^2}} \times$$

$$\left[-\frac{4}{\lambda_1^2} + \frac{4\rho_h^2}{\lambda_1^4} \right] \quad (\text{N.6})$$

Usando a normalização de $g(z_h)$, temos:

$$\langle \beta | T_{\perp} | \beta \rangle = \int_0^{\infty} d\rho_h \rho_h A^2 e^{-\frac{2\rho_h^2}{\lambda_1^2}} \times$$

$$\left[-\frac{4}{\lambda_1^2} + \frac{4\rho_h^2}{\lambda_1^4} \right] \quad (\text{N.7})$$

Calculando cada uma das integrais acima, temos:

$$\langle \beta | T_{\perp} | \beta \rangle = \frac{\hbar^2}{m_v^* \lambda_1^2} \quad (\text{N.8})$$

Agora vamos calcular $\langle \beta | T_{z_h} | \beta \rangle$.

Novamente usando a completude da base $\{\vec{r}_h\}$, podemos escrever $T_{z_h} | \beta \rangle$ como:

$$T_{z_h} | \beta \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m_v^*} \frac{d^2}{dz^2} B [g_1(z) + g_2(z)] f(\rho_h) \quad (\text{N.9})$$

onde $g_1(z) = e^{-\frac{(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}}$ e $g_2(z) = e^{-\frac{(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}}$, que são as gaussianas que formam a parte em z_h da função de onda do buraco.

$$\frac{d^2 g_1(z)}{dz^2} = -\frac{2}{\lambda_2^2} g_1(z) + \frac{4}{\lambda_2^4} (z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2 g_1(z) \quad (\text{N.10})$$

$$\frac{d^2 g_2(z)}{dz^2} = -\frac{2}{\lambda_2^2} g_2(z) + \frac{4}{\lambda_2^4} (z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2 g_2(z) \quad (\text{N.11})$$

De modo que:

$$\langle \beta | T_z | \beta \rangle = \int_0^{\infty} d\rho_h \rho_h \int_{-\infty}^{\infty} dz_h \beta(\vec{r}_h) \frac{\partial^2 \beta(\vec{r}_h)}{\partial z^2} \quad (\text{N.12})$$

Mas, usando as equações (N.10) e (N.11), podemos escrever:

$$\begin{aligned} \beta(\vec{r}_h) \frac{\partial^2 \beta(\vec{r}_h)}{\partial z^2} = f(\rho_h) B^2 \left[-\frac{2}{\lambda_2^2} g_1^2(z_h) + \frac{4}{\lambda_2^4} (z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2 g_1^2(z_h) - \frac{2}{\lambda_2^2} g_1(z_h) g_2(z_h) \right. \\ \left. + \frac{4}{\lambda_2^4} (z_h - \frac{L}{2} - \lambda_3 - H)^2 g_1(z_h) g_2(z_h) - \frac{2}{\lambda_2^2} g_1(z_h) g_2(z_h) + \frac{4}{\lambda_2^4} (z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^3 g_1(z_h) g_2(z_h) \right] \end{aligned}$$

$$-\frac{2}{\lambda_2^2}g_2^2(z_h) + \frac{4}{\lambda_2^4}\left(z_h - \frac{L}{2} - \lambda_3 - H\right)g_2^2(z_h)\Big] \quad (\text{N.13})$$

$$= f(\rho_h)B^2 \left[-\frac{2}{\lambda_2^2} \left(g_1^2(z_h) + g_2^2(z_h) + 2g_1(z_h)g_2(z_h) \right) + \frac{4}{\lambda_2^4} \left(\left(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3 \right)^2 \right. \right. \\ \left. \left. + \left(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3 \right)^2 \right) g_1(z_h)g_2(z_h) + \frac{4}{\lambda_2^4} \left(\left(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3 \right)^2 g_1^2(z_h) \right. \right. \\ \left. \left. + \left(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3 \right)^2 g_2^2(z_h) \right) \right] \quad (\text{N.14})$$

Mas, note que:

$$\frac{2}{\lambda_2^2}f(\rho_h)B^2 \left(g_1^2(z_h) + g_2^2(z_h) + 2g_1(z_h)g_2(z_h) \right) = -\frac{2}{\lambda_2^2}\beta^2(\vec{\tau}_h) \quad (\text{N.15})$$

Dessa forma, temos:

$$\langle \beta | T_{z_h} | \beta \rangle = -\frac{2}{\lambda_2^2} \int d\vec{\tau}_h \beta^2(\vec{\tau}_h) + \int_0^\infty d\rho_h \rho_h f(\rho_h) \times \\ B^2 \frac{4}{\lambda_2^4} \left[\int_{-\infty}^\infty dz_h \left[\left(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3 \right)^2 + \left(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3 \right)^2 \right] g_1(z_h)g_2(z_h) \right. \\ \left. + \frac{4}{\lambda_2^4} B^2 \left[\int_{-\infty}^\infty dz_h \left(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3 \right)^2 g_1^2(z_h) + \int_{-\infty}^\infty dz_h \left(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3 \right)^2 g_2^2(z_h) \right] \right] \quad (\text{N.16})$$

A primeira integral é:

$$-\frac{2}{\lambda_2^2} \int d\vec{\tau}_h \beta^2(\vec{\tau}_h) = -\frac{2}{\lambda_2^2} \quad (\text{N.17})$$

pois $\beta(\vec{\tau}_h)$ é normalizada.

As duas últimas integrais são equivalentes pois:

$$\int_{-\infty}^\infty dz_h \left(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3 \right)^2 g_2^2(z_h) = \int_{-\infty}^\infty dz_h \left[\left(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3 \right)^2 \times \right. \\ \left. e^{-\frac{\left(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3 \right)^2}{\lambda_2^2}} \right] \quad (\text{N.18})$$

Fazendo a mudança de variável $z'_h + H = z_h$, a equação (N.18) fica:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz'_h \left(z'_h - \frac{L}{2} - \lambda_3 \right)^2 e^{-\frac{(z'_h - \frac{L}{2} - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} = \frac{\lambda_2^2}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \lambda_2 \quad (\text{N.19})$$

De modo que:

$$\begin{aligned} \frac{4}{\lambda_2^4} B^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} dz_h \left(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3 \right)^2 g_1^2(z_h) + \int_{-\infty}^{\infty} dz_h \left(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3 \right)^2 g_2^2(z_h) \right] \\ = \frac{1}{(I+1)\lambda_2^2} \end{aligned} \quad (\text{N.20})$$

que é equivalente à penúltima integral de (N.16). Assim, podemos reescrever (N.16), usando o fato de $f(\rho_h)$ ser normalizada, e em conjunto com as equações (N.19) e (N.20) como:

$$\begin{aligned} \langle \beta | T_{z_h} | \beta \rangle = -\frac{2}{\lambda_2^2} + \frac{1}{(I+1)\lambda_2^2} + B^2 \frac{4}{\lambda_2^4} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dz_h \left[\left(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3 \right)^2 + \left(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3 \right)^2 \right] \right. \\ \left. \times g_1(z_h) g_2(z_h) \right] \end{aligned} \quad (\text{N.21})$$

Ainda nos falta calcular a última integral de (N.21). Para isso, vamos trabalhar o seu argumento.

Já mostramos que :

$$\begin{aligned} \left(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3 \right)^2 + \left(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3 \right)^2 = 2 \left[\left(z_h - \frac{H}{2} \right)^2 \right. \\ \left. + \left(\frac{L}{2} + \lambda_3 \right) \left(\frac{L}{2} + H + \lambda_3 \right) + \frac{3}{4} H^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{N.22})$$

De forma que (N.22) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} \frac{8B^2}{\lambda_2^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz_h \left[\left[\left(z_h + \frac{H}{2} \right) + \left(\frac{L}{2} + \lambda_3 \right) \left(\frac{L}{2} + H + \lambda_3 \right) + \frac{3}{4} H^2 \right] \times \right. \\ \left. e^{-\frac{2}{\lambda_2^2} \left[\left(z_h - \frac{H}{2} \right)^2 + \left(\frac{L}{2} + \lambda_3 \right) \left(\frac{L}{2} + H + \lambda_3 \right) + \frac{3}{4} H^2 \right]} \right] \quad (\text{N.23}) \\ = \frac{8B^2}{\lambda_2^2} I \left[\int_{-\infty}^{\infty} dz_h \left[\left(\frac{L}{2} + \lambda_3 \right) \left(\frac{L}{2} + H + \lambda_3 \right) + \frac{3}{4} H^2 \right] e^{-\frac{2}{\lambda_2^2} \left(z_h - \frac{H}{2} \right)^2} \right] \end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz_h \left(z_h - \frac{H}{2} \right)^2 e^{-\frac{2}{\lambda_2^2} \left(z_h - \frac{H}{2} \right)} \quad (\text{N.24})$$

$$= \frac{8B^2}{\lambda_2^2} I \left\{ \left[\left(\frac{L}{2} + \lambda_3 \right) \left(\frac{L}{2} + H + \lambda_3 \right) + \frac{3}{4} H^2 \right] \sqrt{\frac{\pi}{2}} \lambda_2 + \frac{\lambda_2^2}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \lambda_2 \right\} \quad (\text{N.25})$$

Após um pouco de álgebra elementar (N.25) pode ser escrito como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_v^*} \left\{ \frac{I}{(I+1)\lambda_2^2} + \frac{4I}{\lambda_2^4} \left[\left(\frac{L}{2} + \lambda_3 \right) \left(\frac{L}{2} + H + \lambda_3 \right) + \frac{3}{4} H^2 \right] \right\} \quad (\text{N.26})$$

Finalmente, podemos escrever $\langle \beta | T_{z_h} | \beta \rangle$ como:

$$\begin{aligned} \langle \beta | T_{z_h} | \beta \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m_v^*} \left\{ -\frac{2}{\lambda_2^2} + \frac{1}{(I+1)\lambda_2^2} + \frac{I}{(I+1)\lambda_2^2} + \right. \\ &\quad \left. \frac{4I}{\lambda_2^4} \left[\left(\frac{L}{2} + \lambda_3 \right) \left(\frac{L}{2} + H + \lambda_3 \right) + \frac{3}{4} H^2 \right] \right\} \quad (\text{N.27}) \end{aligned}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_v^*} \left\{ -\frac{1}{\lambda_2^2} + \frac{4I}{\lambda_2^4} \left[\left(\frac{L}{2} + \lambda_3 \right) \left(\frac{L}{2} + H + \lambda_3 \right) + \frac{3}{4} H^2 \right] \right\} \quad (\text{N.28})$$

Apêndice O

Cálculo do Potencial Efetivo Sofrido Pelo Buraco

Nesse apêndice vamos calcular os termos de energia referentes ao potencial efetivo do buraco.

O primeiro termo a ser calculado é:

$$W_{PQ} = \langle \beta \left| V_e Y \left(z^2 - \frac{L^2}{4} \right) \right| \beta \rangle \quad (\text{O.1})$$

Que pode ser escrito como:

$$V_e A^2 \int_0^\infty d\rho_h \rho_h f(\rho_h) B^2 \int_{-\infty}^\infty dz_h \left[e^{-\frac{(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + e^{-\frac{(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} \right] Y \left(z_h^2 - \frac{L}{2} \right) \quad (\text{O.2})$$

Explorando que $f(\rho_h)$ é normalizada, temos:

$$W_{PQ} = V_e B^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz_h \left[e^{-\frac{(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + e^{-\frac{(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} \right] \quad (\text{O.3})$$

Outro termo que devemos calcular é:

$$V_{QD} = \langle \beta \left| V_e Y \left(z - \frac{L}{2} \right) Y \left(r_0^2 - \rho_h^2 - (z_h - z_0)^2 \right) \right| \beta \rangle \quad (\text{O.4})$$

Que pode ser escrito como:

$$V_e \left[\int_{-\infty}^{\infty} dz_h B^2 \left[e^{-\frac{(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + e^{-\frac{(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} \right]^2 \times \right. \\ \left. A^2 \int_0^{\infty} d\rho_h \rho_h e^{-\frac{2(\rho_h - \lambda_4)^2}{\lambda_1^2}} Y\left(z - \frac{L}{2}\right) Y\left(r_0^2 - \rho_h^2 - (z_h - z_0)^2\right) \right] \quad (O.5)$$

De forma que esse termo fica:

$$V_{DQ} = V_e \left[\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz_h B^2 \left[e^{-\frac{(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + e^{-\frac{(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} \right]^2 \times \right. \\ \left. A^2 \int_0^{\sqrt{r_0^2 - (z - z_0)^2}} d\rho_h \rho_h e^{-\frac{2(\rho_h - \lambda_4)^2}{\lambda_1^2}} \right] \quad (O.6)$$

Esses foram os termos do potencial efetivo referentes à barreira. Vejamos agora como fica o termo de interação Coulombiana V_{e-h} .

$$V_{e-h} = \frac{e^2}{\kappa} \langle \beta | \otimes \langle \alpha | \left| \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right| \alpha \rangle \otimes \beta \quad (O.7)$$

Já vimos que (ver apêndice L):

$$\langle \alpha | \left| \frac{1}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right| \alpha \rangle = \int_0^{\infty} dk J_0(k\rho_h) e^{\frac{k^2\lambda^2}{6}} \int_{-\infty}^{\infty} dz_e |f(z_e)|^2 e^{-k|z_e - z_h|} \quad (O.8)$$

De modo que, combinando as equações (O.8) e (O.7), temos:

$$V_{e-h} = \frac{e^2}{\kappa} \int_0^{\infty} dke^{-\frac{k^2\lambda^2}{6}} \int_0^{\infty} d\rho_h \rho_h e^{-\frac{2\rho_h^2}{\lambda_1^2}} A^2 J_0(k\rho_h) \times \\ \int_{-\infty}^{\infty} dz_h B^2 \left[e^{-\frac{(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + e^{-\frac{(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} \right]^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz_e |f(z_e)|^2 e^{-k|z_e - z_h|} \quad (O.9)$$

A integral em ρ_h é conhecida, de forma que podemos escrever (O.9) como:

$$V_{e-h} = \frac{e^2}{\kappa} \int_0^{\infty} dke^{-\frac{k^2\lambda^2}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} dz_h B^2 \left[e^{-\frac{(z_h + \frac{L}{2} + \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} + e^{-\frac{(z_h - \frac{L}{2} - H - \lambda_3)^2}{\lambda_2^2}} \right]^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz_e |f(z_e)|^2 e^{-k|z_e - z_h|} \quad (O.10)$$

Resolvemos as integrais de (O.10) numericamente.

Com isso, determinamos o potencial efetivo que atua sobre o buraco.

Apêndice P

Cálculo da Energia de Interação Elétron-Elétron

Nesse apêndice vamos mostrar que a energia de interação elétron-elétron pode ser escrita como:

$$E_{e-e} = \langle \alpha | \otimes \langle \alpha | \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_{e1} - \vec{r}_{e1}|} | \alpha \rangle \otimes | \alpha \rangle = \int_0^\infty dk e^{-\frac{k^2 \lambda^2}{4}} \int_{-\infty}^\infty |f(z_{e2})|^2 dz_{e2} \\ \times \int_{-\infty}^\infty |f(z_{e1})|^2 e^{-k|z_{e1} - z_{e2}|} dz_{e1} \quad (\text{P.1})$$

Já conhecemos $\langle \alpha | \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_{e1} - \vec{r}_{e2}|} | \alpha \rangle$ (ver apêndice O):

$$\langle \alpha | \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_{e1} - \vec{r}_{e2}|} | \alpha \rangle = \int_0^\infty dk J_0(k\rho_{e2}) e^{-\frac{k^2 \lambda^2}{8}} \int_{-\infty}^\infty dz_{e1} |f(z_{e1})|^2 e^{-k|z_{e1} - z_{e2}|} \quad (\text{P.2})$$

Aqui usamos a completeza da base $\{|\vec{r}_{e1}\rangle\}$ e que $\langle \vec{r}_{e1} | \alpha \rangle = N_\lambda e^{-\frac{z_{e1}^2}{\lambda^2}} f(z_{e1})$

Agora, usando a completeza de $\{|\vec{r}_{e2}\rangle\}$ e que $\langle \vec{r}_{e2} | \alpha \rangle = N_\lambda e^{-\frac{z_{e2}^2}{\lambda^2}} f(z_{e2})$, vamos calcular $\langle \alpha | \otimes \langle \alpha | \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_{e1} - \vec{r}_{e2}|} | \alpha \rangle \otimes | \alpha \rangle$

$$\langle \alpha | \otimes \langle \alpha | \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_{e1} - \vec{r}_{e2}|} | \alpha \rangle \otimes | \alpha \rangle = \langle \alpha | \int_0^\infty dk J_0(k\rho_{e1}) e^{-\frac{k^2 \lambda^2}{8}} \int_{-\infty}^\infty dz_{e1} |f(z_{e1})|^2 e^{-k|z_{e1} - z_{e2}|} | \alpha \rangle \\ = \int_0^{2\pi} d\varphi_{e2} \int_{-\infty}^\infty dz_{e2} \int_0^\infty d\rho_{e2} \rho_{e2} \int_0^\infty dk J_0(k\rho_{e2}) \int_{-\infty}^\infty dz_{e1} |f(z_{e1})|^2 e^{-k|z_{e1} - z_{e2}|} e^{-\frac{\rho_{e2}^2}{\lambda^2}} N_\lambda^2$$

$$\begin{aligned}
&= 2\pi N_\lambda^2 \int_0^\infty dk e^{-\frac{k^2 \lambda^2}{8}} \int_{-\infty}^\infty dz_{e2} |f(z_{e2})|^2 \int_{-\infty}^\infty dz_{e1} |f(z_{e1})|^2 e^{-k|z_{e1}-z_{e2}|} \\
&\quad \times \int_0^\infty d\rho_{e2} \rho_{e2} J_0(k\rho_{e2}) e^{-\frac{\rho_{e2}^2}{\lambda^2}} \tag{P.3}
\end{aligned}$$

Novamente usando que:

$$\int_0^\infty d\rho_{e2} \rho_{e2} J_0(k\rho_{e2}) e^{-\frac{\rho_{e2}^2}{\lambda^2}} = \frac{\lambda^2}{4} e^{-\frac{k^2 \lambda^2}{8}} \tag{P.4}$$

Escrevemos (P.3) como:

$$\int_0^\infty dk e^{-\frac{k^2 \lambda^2}{4}} \int_{-\infty}^\infty |f(z_{e2})|^2 dz_{e2} \int_{-\infty}^\infty |f(z_{e1})|^2 e^{-k|z_{e1}-z_{e2}|} dz_{e1} \tag{P.5}$$

Como queriamos demonstrar.

Bibliografia

- [1] Reed M. A., Bate R. T., Bradshaw K., Duncan W.M., Fresley W. M., Lee J. W., Smith H.D., Spatial quantization in GaAs-AlGaAs multiple quantum dots, *J. Vacuum Sci. Technol. B*, **4**, 358 (1986).
- [2] Cibert J., Petroff P.M., Dolan G. J., Pearton S. J., Gossard A. C., English J. H., Optically detected carrier confinement to one to zero dimension in GaAs quantum well, wire and boxes, *Appl. Phys. Lett.*, **49**, 1275 (1986).
- [3] Kash K., Scherer A., Worlock J. M., Craighead H. G., Tamargo M. C., Optical spectroscopy of ultrasmall structures etched from quantum well, *Appl. Phys. Lett.*, **49**, 1043 (1986).
- [4] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs, *Quantum Dots*, ed. by Springer (1997)
- [5] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars and P. M. Petroff, Direct formation of quantum-sized dots from uniform coherent islands of In-GaAs on GaAs surface, *Appl. Phys. Lett.*, **63**, 23 (1993)
- [6] K. Alchalabi, D. Zimin, G. Kostorz and H. Zoog, Self-Assembled Semiconductor Quantum Dots with Nearly Uniform Sizes, *Phys. Rev. Lett.*, **90**, (2003).
- [7] M. Bayer, O. Stern, P. Hawrylak, S. Fafard and Forchel; *Nature*, **405**, 923-926, (2000).
- [8] M.C. Bödefeld, R.J. Warburton, K. Kanai, J.P. Kotthaus, G. Medeiros-Ribeiro and P.M. Petroff; *Appl. Phys. Lett.*; **74**; 1839; (1999)
- [9] E. Ribeiro, F. Cerdeira, M.J.S.P. Brasil, T. Heinzl, K. Ensslin, G. Medeiros-Ribeiro and P.M. Petroff An optical study of self-assembled $In_xGa_{1-x}As/GaAs$

- quantum dots embedded in a two-dimensional electron gas *J. of Appl. Phys.*, **87**, 11, (2000)
- [10] M.K.K. Nakaema, M.J.S. Brasil, F. Iikawa, E. Ribeiro, T. Heinzel, K Ensslin, G. Medeiro-Ribeiro, P.M. Petroff, J.A. Brum., Micro-photoluminescence of self-assembled
- [11] M.K.K. Nakaema et. al. *On the origin of the blueshift from type-II quantum dots emission using microphotoluminescence*, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 14, 2002.
- [12] Bastard G. , *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*, Les Éditions de Physique
- [13] Ph. Lelong, K. Suzuki, . Bastard, H. Sakaki, Y. Arakawa, *Enhancement of the Coulomb correlations in type-II quantum dots*, *Physica E* , **7**, 2000.
- [14] R.E. Nahory, M.A.Polack W.D.Johnston, R.L.Barns *Band gap versus composition and demonstration of Vegard's law for $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ lattice matched to InP*, *Appl. Phys. Lett.*,**37**, (1978)
- [15] I. Kegel, T.H. Metzger, A. Lorke, J. Peisl, J. Stangl, G. Bauer, J.M. Garcia and P.M. Petroff; *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 1694, (2000).
- [16] C. B. Murray at Inter American Workshop on the use of Synchrotron Radiation for Research and Symposium on Nanotechnologies, LNLS, Campinas, February 12th, 2001.
- [17] Hawrylak, P. and Wojs, A *Semicond. Sci. Technol.* **11** 1516 (1996)
- [18] Benzhong Wang and Soo-Jin Chua, *Growth and optical properties of type-II InP/GaAs self-organized quantum dots*. *Appl. Phys. Lett.* **87**, 5, 2001.
- [19] A.V. Dvurechesnskii and A.I. Yakimov, *Type-II Ge/Si Quantum Dots*, *Semiconductors*, **35**, 9, 2001.
- [20] J.J. Sakuray; *Modern Quantum Mechanics*; Addison-Wesley Publishing Company.

- [21] Ruggiero, M.A.G.; Lopes, V.L. da R.; *Cálculo Numérico, Aspectos Teóricos e Computacionais*, McGRAW-HILL, 1996.
- [22] Jackson, L.D., *Classical Electrodynamics*, by Jonh Wiley & Sons, INC.
- [23] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik; *Table of Integrals, Series and Products*; Academic Press; (1980)