

“EFEITOS DA INTERAÇÃO ELÉTRON-ELÉTRON NA
ESTRUTURA ELETRÔNICA E NAS PROPRIEDADES
DE TRANSPORTE EM PONTOS QUÂNTICOS E ANÉIS
QUÂNTICOS SEMICONDUTORES”

Leonardo Kleber Castelano

Tese apresentada ao Instituto de Física de
São Carlos, Universidade de São Paulo,
para obtenção do título de **Doutor** em
Ciências: **Física Básica**.

Orientador: Prof. Dr. Guo-Qiang Hai

SÃO CARLOS

2006

Castelano, Leonardo Kleber

Efeitos da interação elétron-elétron na estrutura eletrônica e nas propriedades de transporte em pontos quânticos e anéis quânticos semicondutores /Leonardo Kleber Castelano – São Carlos, 2006.

<104> p.

Tese (Doutorado) – Instituto de Física de São Carlos, 2006.

Orientador: Prof. Dr. Guo-Qiang Hai

1. Ponto quântico. 2. Anel quântico. 3. Transporte eletrônico.
 4. Teoria do funcional densidade. 5. Interação elétron-elétron
- I. Título.

Dedico esta tese aos meus pais
Marta e Jorge,
primeiramente por gerarem
a condição do meu nascimento,
segundo por terem se esforçado
para que eu pudesse chegar até aqui,
enfim por todo carinho e amor.

Agradecimentos

Ao Prof. Guo-Qiang Hai por ter me orientado com toda sua dedicação e competência. Obrigado pela preocupação com minha formação e com o prosseguimento da minha carreira científica. Agradeço-lhe também pelos laços de amizade que se formaram durante estes anos e pela confiança depositada em mim.

Ao Prof. Mu-Tao Lee por ter participado diretamente da realização deste trabalho, usando toda sua experiência para ajudar-nos a resolver os problemas que apareceram e dando sugestões sempre proveitosas.

Ao Prof. Francisco Alcaraz que cedeu o *cluster* para que eu fizesse grande parte dos cálculos numéricos. Ao colega Gilberto Nakamura que me auxiliou com os problemas que apareceram durante a utilização do *cluster*.

Aos funcionários do IFSC que tornam nosso trabalho mais fácil e confortável. Especialmente ao Haroldo Arakaki que sempre está disposto a resolver os diversos problemas. À Isabel Rosani que me ajudou com as questões burocráticas e às bibliotecárias que sempre me atenderam com simpatia.

Ao camarada Kahio Mazon que me incentivou com suas idéias e devaneios e teve sua participação no início desta tese.

À todos os meus amigos, Ronny, Marcel, Tio Li, Mobral, Soraia, Thiago, Bruna, Amanda, Matheus, Alexandre, Felipe, Maurício, Helena, Juliano, José Fernando, Tio Nelson, Tia Maria Luiza, Luiz Nelson, Dudu, Daniel, Nenão, Raquel, Ronaldo, Marco, Hideki, Sérgio, Hideto, Ueki, Ayako, Yukimi, Elza, Solemar, Giovanni, Henrique Freire e Marconi. Especialmente ao meu amigo Emanuel por ter lido e feito comentários à respeito desta tese.

Aos meus antigos e novos familiares, com os quais tive muitos momentos de alegria e tristeza.

Ao meu irmão Leandro, à minha cunhada Carla e à minha linda sobrinha Gabriela.

Aos pais e irmãos da Marina, Vilmar, Regina, Danilo e Ciro por serem pessoas tão legais.

Ao mestre Takamori por iluminar a minha vida.

Especialmente à minha querida esposa Marina que me socorre nas angústias e que multiplica minhas alegrias.

À todos aqueles que esqueci de agradecer.

À FAPESP pelo apoio financeiro.

Sumário

Resumo	iv
Abstract	v
1 Introdução	1
1.1 Fabricação experimental	2
1.2 Resultados experimentais	6
1.3 Estrutura da tese	10
2 Estrutura eletrônica de anéis quânticos acoplados	12
2.1 Introdução	12
2.2 Anéis quânticos: níveis de uma partícula	13
2.3 Modelo teórico	16
2.4 Resultados	19
2.5 Conclusão	33
3 Transporte em pontos quânticos	34
3.1 Introdução	34
3.2 Sistema elétron+QD	35
3.3 Equação de Lippmann-Schwinger	39
3.3.1 Expansão em ondas parciais	42
3.3.2 Phase shift	44
3.4 Equação de LS para o QD confinado	45
3.4.1 Condutância	47

3.5	Aplicações	48
3.5.1	Espalhamento elástico	48
3.5.2	Espalhamento multi-canal	52
3.5.3	Espalhamento pelo QD confinado	53
3.6	Resultados	54
3.6.1	Convergência do MCF	56
3.6.2	Espalhamento elástico	57
3.6.3	Espalhamento multi-canal	69
3.6.4	Espalhamento pelo QD confinado	74
3.7	Conclusão	80
4	Conclusão e perspectivas	81
	Referências Bibliográficas	82
	Apêndice A	89
A.1	Teoria do funcional densidade dependente de spin (SDFT)	89
A.2	O Formalismo Kohn-Sham	90
A.3	Local Density Approximation (LDA)	91
	Apêndice B	93
B.1	Método das Frações Contínuas (MCF)	93
	Apêndice C	97
C.1	Espalhamento por três canais	97
	Apêndice D	101
D.1	Cálculo do potencial de troca: Ondas parciais	101
D.2	Cálculo do potencial de troca: Confinado	103

Resumo

Esta tese é composta por duas partes. Na primeira parte, os efeitos da interação elétron-elétron nas configurações do estado fundamental de dois anéis quânticos acoplados (CQRs) são estudados. Os CQRs podem formar um novo tipo de molécula artificial, onde o raio dos anéis r_0 juntamente com a distância entre os anéis d , são novos parâmetros ajustáveis que fornecem novos graus de liberdade para controlar a estrutura eletrônica destas moléculas. Através da bem estabelecida teoria do funcional densidade dependente de spin, as configurações ou fases do estado fundamental dos CQRs com alguns elétrons são determinadas. Uma rica variedade de fases para o estado fundamental destas novas moléculas artificiais é encontrada para sistemas contendo até $N = 13$ elétrons. Para CQRs com $N \leq 8$ são obtidas qualitativamente configurações para o estado fundamental similares às dos pontos quânticos acoplados (CQDs). As novas configurações eletrônicas aparecem para $N \geq 9$. Na segunda parte desta tese é desenvolvido um método numérico para estudar o espalhamento eletrônico através de um ponto quântico com N -elétrons confinados. Considera-se que o ponto quântico está imerso num sistema bidimensional ou confinado em um canal unidimensional. As taxas de espalhamento são obtidas resolvendo iterativamente a equação de Lippmann-Schwinger incluindo a interação elétron-elétron entre o elétron incidente e os N -elétrons confinados dentro do QD. Para exemplificar, este método é aplicado para um elétron externamente injetado sobre um QD contendo um único elétron. As taxas de espalhamento elástico, inelástico e de *spin-flip* são obtidas. Os efeitos da interação de troca no espalhamento eletrônico e transporte através do QD são analisados. Também são considerados os processos do espalhamento multi-canal neste sistema e suas influências nas propriedades de transporte.

Abstract

This thesis is composed of two parts. In the first part, we study the effects of electron-electron interactions on the ground state configurations of two vertically coupled quantum rings (CQRs). The CQRs can form a new type of artificial molecule (AM) where the ring radius r_0 together with the inter-ring distance d are new tunable parameters providing new degrees of freedom to modulate and control the electronic structure of the artificial ring shaped molecules. In this work, we apply the well established spin-density functional theory to study the ground state configurations or phases of few-electron CQRs. A rich range of ground state phases of these new quantum ring AMs is uncovered for systems containing up to $N = 13$ electrons. For CQRs with $N \leq 8$ we found qualitatively similar ground state phases as for coupled quantum dots (CQDs). Novel phases appear for $N \geq 9$. In the second part of this thesis, we develop a numerical method to study the electron scattering through an occupied quantum dot (QD) with a few electrons. The QD is considered embedded in a two-dimensional system or confined in a one-dimensional channel. An external electron is injected and scattered through the QD. The scattering rates are obtained by solving iteratively the Lippmann-Schwinger equation including the electron-electron interactions between the incident electron and the N -electrons confined in the QD. As an example, we apply this model for an externally injected electron through a QD with one electron inside. The elastic, inelastic, and spin-flip scattering rates are obtained. The effects of electron exchange interaction on the electron scattering and transport through the QD are analyzed. We also show the multi-channel scattering processes in such systems and their influences on the electron transport properties.

Capítulo 1

Introdução

Técnicas modernas de crescimento de semicondutores, como *Molecular Beam Epitaxy* (MBE), *Metal Organic Chemical Vapor Deposition* (MOCVD) e litografia de feixe eletrônico permitem a criação de nano-estruturas que confinam os elétrons nas três direções, tais como pontos quânticos (átomos artificiais), pontos quânticos acoplados (molécula artificial) e anéis quânticos (QRs¹). Inúmeras aplicações destas nano-estruturas para a criação de novos dispositivos quânticos têm sido exploradas nos últimos anos. Por exemplo, os pontos quânticos já são usados para a fabricação de *lasers* mais eficientes [1] e os pontos quânticos acoplados foram propostos para serem utilizados como porta lógica quântica [2,3], fundamental para a realização da computação quântica. Também as nano-estruturas semicondutoras são sistemas onde é possível controlar sua forma, seu tamanho, sua estrutura de níveis e o número de elétrons confinados. Além do interesse tecnológico, estas estruturas artificiais podem ser consideradas como pequenos “laboratórios” para estudar teorias fundamentais da física, como a mecânica quântica e a teoria de muitos corpos.

Os resultados experimentais demonstraram que os átomos artificiais manifestam diversos efeitos devido à interação elétron-elétron, tais como: *Coulomb Blockade* [4,5], *Coulomb Oscillations* [6], a existência de uma estrutura de camadas [7] e o Efeito Kondo [8]. Desta forma, o objetivo deste trabalho é estudar

¹QRs= *Quantum Rings*.

teoricamente os efeitos da interação de Coulomb na estrutura eletrônica e nas propriedades de transporte nestes sistemas. Para tanto, a teoria do funcional densidade dependente de spin (SDFT¹) foi utilizada para determinar o estado fundamental de dois anéis quânticos acoplados (CQRs²). Também as propriedades de transporte, incluindo a interação de Coulomb entre o elétron incidente e o QD, foram obtidas através da solução numérica da equação de Lippmann-Schwinger (LS). Estes tipos de estudos contribuem para um melhor entendimento da importância dos efeitos da interação de Coulomb em pontos e anéis quânticos.

Antes de apresentarmos os estudos que foram realizados nesta tese, vamos introduzir alguns conceitos à respeito de pontos e anéis quânticos. Primeiramente, para melhor compreensão dos átomos ou moléculas artificiais é interessante saber como estes são fabricados, pois existem diferentes técnicas de fabricação e cada uma proporciona um diferente tipo de medida experimental. Para tanto, na próxima seção descrevemos três diferentes formas de fabricação destas nanoestruturas, juntamente com a apresentação de alguns resultados teóricos e experimentais que mostram a relevância dos efeitos de muitos corpos nestes sistemas. No final deste capítulo descrevemos como a presente tese foi estruturada.

1.1 Fabricação experimental

Os átomos artificiais podem ser fabricados, por exemplo, na geometria vertical (Fig. 1.1) ou lateral (Fig. 1.2) e através de técnicas de auto-organização (Fig. 1.3). A Figura 1.1 mostra um desenho esquemático do ponto quântico do tipo vertical. Sobre o substrato de GaAs dopado com Si foram crescidas camadas de 7.5 nm de AlGaAs, 12 nm de InGaAs e 9 nm de AlGaAs e acima foi colocada uma última camada de 500 nm de GaAs dopado com Si [9]. Quando uma camada de InGaAs é crescida entre duas camadas de AlGaAs, forma-se um poço quântico que confina os elétrons. Após o crescimento destas camadas, usou-se técnicas de litografia de feixe eletrônico e técnicas de *etching* (entalhamento) para fabricar um pilar com

¹SDFT=*Spin Density Functional Theory*.

²CQRs=*Coupled Quantum Rings*.

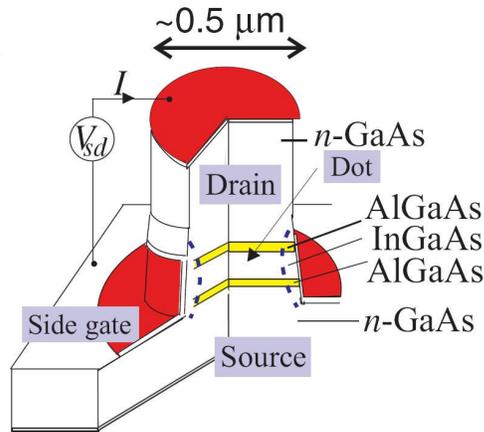


Figura 1.1: Diagrama esquemático da estrutura semicondutora, onde o ponto quântico é localizado entre duas barreiras de AlGaAs. Uma tensão negativa é aplicada no gate lateral, que pressiona o QD reduzindo o seu diâmetro efetivo (curvas tracejadas) (Fig. extraída da ref. [9]).

diâmetro de $0.5 \mu\text{m}$. Este pilar foi encapsulado com um contato metálico, formando o *side gate*, que confina os elétrons no plano perpendicular à direção de crescimento. O ponto quântico fica localizado no centro desta estrutura (Fig. 1.1) e para fazer medidas experimentais, contatos metálicos foram depositados formando a fonte e o dreno.

Outra alternativa para se confinar elétrons é através de um gás de elétrons bidimensional (2DEG³) formado em uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs. Quando o cristal de AlGaAs é crescido sobre o cristal de GaAs, os elétrons que advêm dos dopantes formam o 2DEG no mínimo de potencial, que ocorre na interface entre os dois cristais. Desta forma, os elétrons ficam confinados na direção de crescimento e podem ser confinados nas outras direções pela deposição de contatos metálicos apropriados, como exemplificado na Fig. 1.2.

A terceira maneira de se construir pontos quânticos é usando técnicas de auto-organização. Este processo ocorre durante o crescimento epitaxial de dois ma-

³2DEG=Two Dimensional Electron Gas.

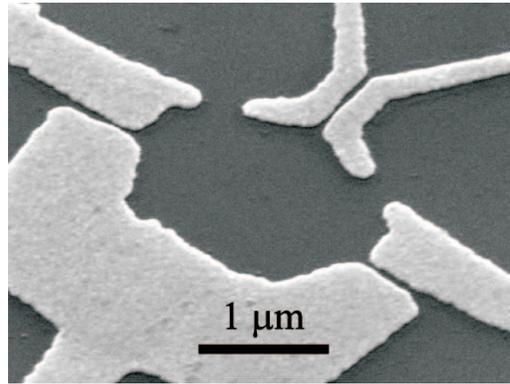


Figura 1.2: Imagem do arranjo experimental de um ponto quântico tipo lateral [10].

teriais semicondutores, que apresentam um desacordo significativo no parâmetro de rede (por exemplo InAs e GaAs). A deposição de InAs sobre GaAs começa de maneira bidimensional, isto é, camada por camada. Entretanto quando estas camadas atingem uma espessura crítica o sistema se rearranja podendo formar pontos ou anéis quânticos auto-organizados (Fig. 1.3).

No caso de anéis quânticos a tecnologia de fabricação é tão avançada quanto a dos pontos quânticos e fabrica-se QRs através das técnicas de auto-organização [11, 12], nanolitografia [13, 14] e *droplet* MBE [15]. Recentemente, foram produzidos QRs auto-organizados empilhados [16], ou seja, camadas de QRs crescidas uma em cima da outra. Um anel quântico auto-organizado é produzido de maneira similar que o ponto quântico, sendo que a diferença fica no crescimento da camada que cobre a nano-estrutura (*cap layer*) [14].

Recentemente foram fabricados pontos quânticos acoplados (CQDs⁴) crescidos através de técnicas de auto-organização na geometria vertical [19], formando uma única molécula artificial. Neste trabalho, foram crescidas duas camadas de QDs auto-organizados e depois esta estrutura foi cortada, usando-se técnicas de litografia, formando um pilar cilíndrico onde foram depositados os contatos metálicos (Fig. 1.4). Utilizando as técnicas de crescimento de QRs auto-organizados desenvolvidas por Granados *et.al.* [16] em conjunto com as técnicas utilizadas por

⁴CQDs = *Coupled Quantum Dots*.

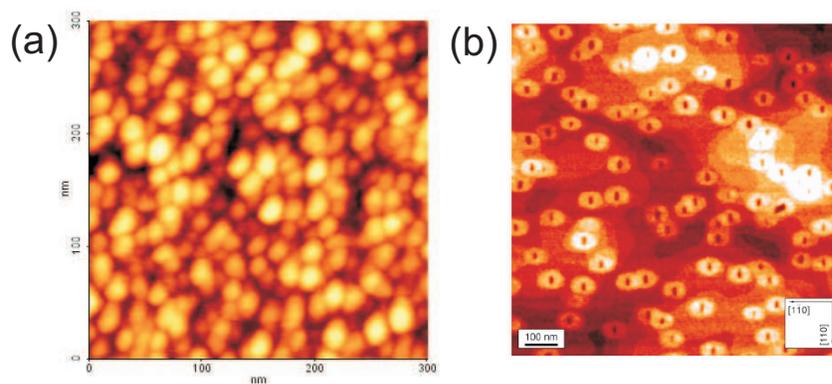


Figura 1.3: Imagem de pontos (a) e anéis (b) quânticos auto-organizados feita por microscópio de força atômica [17].

Ota *et.al.* [19] para se isolar uma única molécula artificial, acreditamos que no futuro medidas experimentais que revelarão a estrutura eletrônica de CQRs auto-organizados poderão ser feitas.

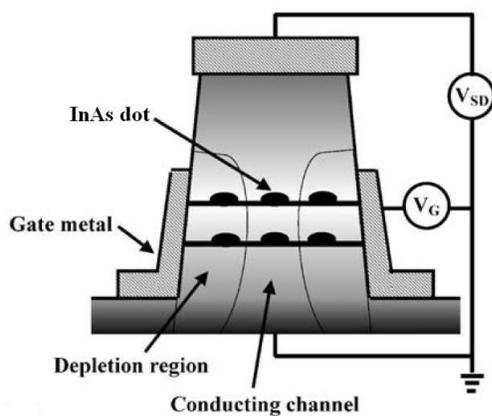


Figura 1.4: Ilustração esquemática do pilar cilíndrico que foi utilizado no experimento de pontos quânticos acoplados auto-organizados de InAs (extraída da ref. [18]).

1.2 Resultados experimentais

Após a compreensão do que é um átomo ou molécula artificial é importante saber qual é a relevância da interação elétron-elétron nestes sistemas. Deste modo, esta seção é dedicada à discussão de alguns resultados experimentais que demonstram a importância dos efeitos de muitos corpos nestas estruturas.

Um dos experimentos mais famosos feito com pontos quânticos, foi a constatação de que estes possuem uma estrutura de camadas como a dos átomos. Esta confirmação foi feita em um QD tipo vertical (Fig. 1.1), através de medidas de tunelamento de um elétron [7, 20]. No caso do QD vertical, quando um elétron move-se na banda de condução, experimenta um potencial na direção de crescimento do material, o qual está esquematizado na Fig. 1.5. As áreas hachuradas representam o nível de Fermi do dreno e da fonte e as linhas dentro do poço, os níveis de energia do QD. Uma pequena voltagem V_{sd} , aplicada entre a fonte e o dreno, desloca o nível de Fermi de um em relação ao outro. Para que a corrente possa fluir o nível vazio de energia mais baixa do QD deve estar entre os potenciais químicos dos eletrodos (Fig. 1.5). Os elétrons também precisam de uma energia extra para superar a repulsão coulombiana e nenhuma corrente irá fluir até que a voltagem aplicada forneça tal energia. Este fenômeno é conhecido

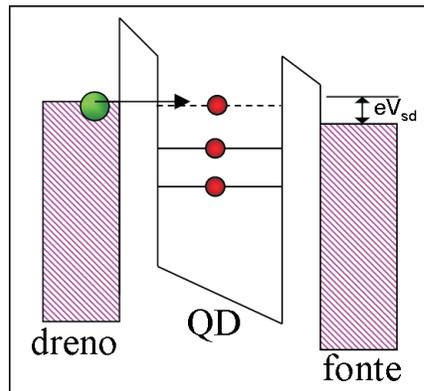


Figura 1.5: Diagrama de energia da banda de condução correspondente ao sistema da Fig. 1.1. As áreas hachuradas representam o nível de Fermi do dreno e da fonte e as linhas dentro do poço os níveis de energia do QD.

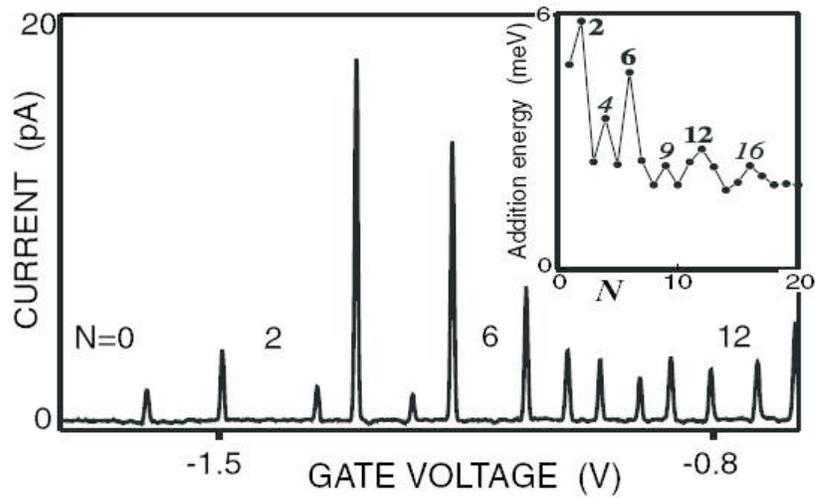


Figura 1.6: Corrente em função da voltagem do *gate*. O primeiro pico marca quando o primeiro elétron entra no QD e o número de elétrons aumenta de um em cada subsequente pico. A distância entre cada pico é proporcional a energia de adição (gráfico inserido) (Fig. extraída da ref. [9]).

como *Coulomb Blockade* [4, 5]. Aplicando uma voltagem V_G no *gate*, em torno do pilar (Fig. 1.1), menos negativa, translada-se a energia dos elétrons dentro do QD para baixo e desta forma, pode-se aumentar o número de elétrons no QD e vice-versa.

Portanto, modificando a voltagem V_G no *gate* observa-se uma série de picos na corrente (Fig. 1.6). Em cada pico o número de elétrons dentro do QD muda de N para $N+1$ e entre os picos o *Coulomb Blockade* mantém N fixo, sem que nenhuma corrente flua entre o dreno e a fonte. A distância entre os picos é proporcional à energia de adição, que é a energia necessária para se incluir um elétron extra dentro do QD. Nota-se na Fig. 1.6 que a energia de adição não é uma constante e que custa mais para adicionar um elétron ao QD, quando este possui 2, 6, 12 e 20 elétrons, ou seja, a configuração eletrônica nestes casos é mais estável. O primeiro pico da Fig. 1.6 marca a voltagem no *gate* que faz com que o primeiro elétron entre no QD, o segundo registra a entrada do segundo elétron e assim por diante.

Um modelo que descreve teoricamente os pontos quânticos é o potencial do

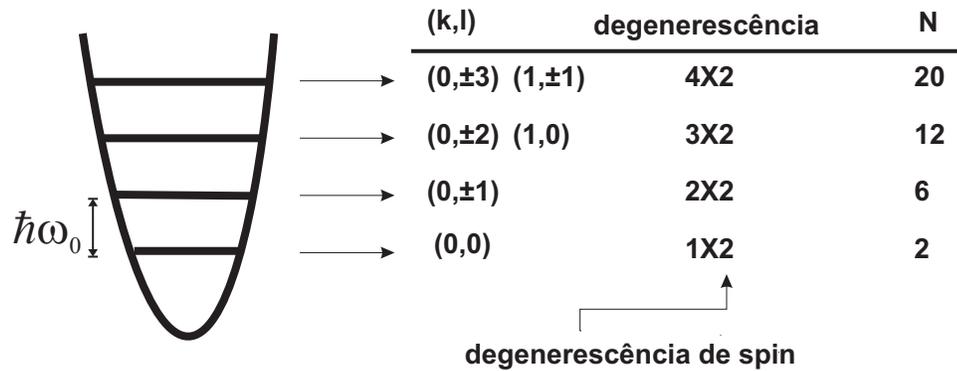


Figura 1.7: Esquema que mostra os níveis de energia de um oscilador harmônico bidimensional. A degenerescência de cada camada é dada, juntamente com o número total de elétrons para cada camada cheia.

oscilador harmônico bidimensional. Os níveis de energia deste potencial podem ser encontrados analiticamente e correspondem à $E_{k,l} = (2k + |l| + 1)\hbar\omega_0$, onde $k = 0, 1, 2, \dots$ é o número quântico radial, $l = 0 \pm 1, \pm 2, \dots$ denota o número quântico correspondente ao momento angular e ω_0 é a frequência do oscilador. Estes níveis de energia consistem em um conjunto de níveis degenerados, separados igualmente por $\hbar\omega_0$. Pode ser visto na Fig. 1.7 a degenerescência destes níveis de energia e o número de elétrons que cada camada cheia possui $N=2, 6, 12, 20, \dots$. Desta forma conclui-se que o potencial do oscilador harmônico apresenta uma estrutura de camadas que corresponde aos resultados experimentais da energia de adição (Fig. 1.6). Cálculos mais aprimorados como Hartree, Hartree-Fock, diagonalização exata e teoria do densidade funcional dependente de spin (SDFT) confirmaram os resultados experimentais usando o potencial do oscilador harmônico para descrever o QD teoricamente [21–27].

No caso de pontos quânticos acoplados, a estrutura eletrônica também foi estudada por muitos pesquisadores nos últimos anos, tanto experimentalmente [18, 28, 30] quanto teoricamente [27, 29, 31]. A Fig. 1.8 apresenta a energia de adição de dois CQDs obtida (a) experimentalmente [28] e (b) através de cálculos auto-consistentes (SDFT) [29]. Os resultados teóricos mostram que para pequenas distâncias entre os QDs, a energia de adição é similar de um único QD

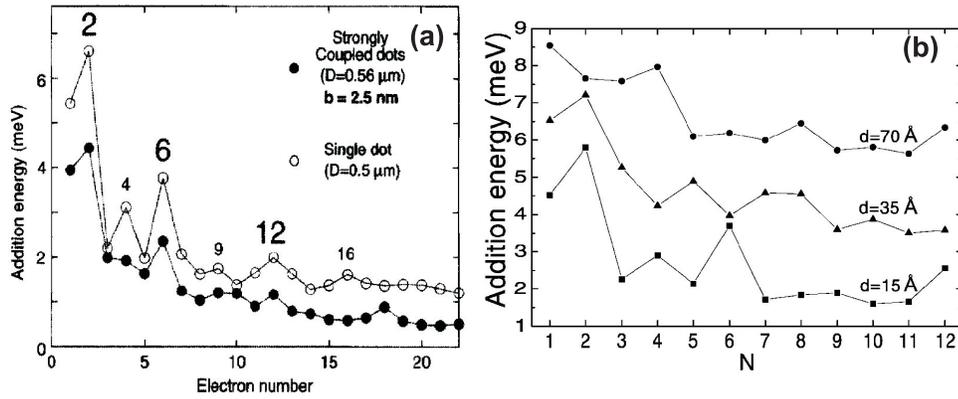


Figura 1.8: Energia de adição para dois pontos quânticos acoplados (a) resultado experimental [28] e (b) resultado calculado através de SDFD [29]. No resultado experimental (a) D é o diâmetro do QD e $b=2.5$ nm é a distância entre os QDs e no resultado teórico (b) d é a distância entre os QDs.

($d=15\text{\AA}$ na Fig. 1.8(b)), o que está de acordo com o resultado experimental (Fig. 1.8(a)). Quando a distância entre os QDs aumenta, nota-se que a energia de adição depende sensivelmente dos níveis moleculares dos pontos quânticos acoplados. Estes níveis moleculares aparecem para distâncias intermediárias entre os QDs, como pode ser visto na Fig. 1.9. Também nesta figura verifica-se que com a mudança da distância entre os QDs, ocorre a alteração do estado fundamental dos CQDs. Quando o valor desta distância é pequeno os CQDs se comportam como um único QD (fase atômica) e quando o valor da distância entre os QDs é grande, os CQDs se comportam como se fossem dois QDs desacoplados (fase atômica). As fases moleculares se manifestam para valores intermediários da distância entre os QDs.

As medidas experimentais de transporte [7, 20] mostram a existência do *Coulomb blockade*, a estrutura de camadas e os máximos na energia de adição. Além destes experimentos, existem outros que constataram que os pontos quânticos exibem a transição entre os estados singleto e tripleto [9], *Coulomb diamonds* [9] e o efeito Kondo [8]. Deste modo, conclui-se que os efeitos da interação de Coulomb são essenciais para entender tanto a estrutura eletrônica de átomos artificiais quanto suas propriedades de transporte.

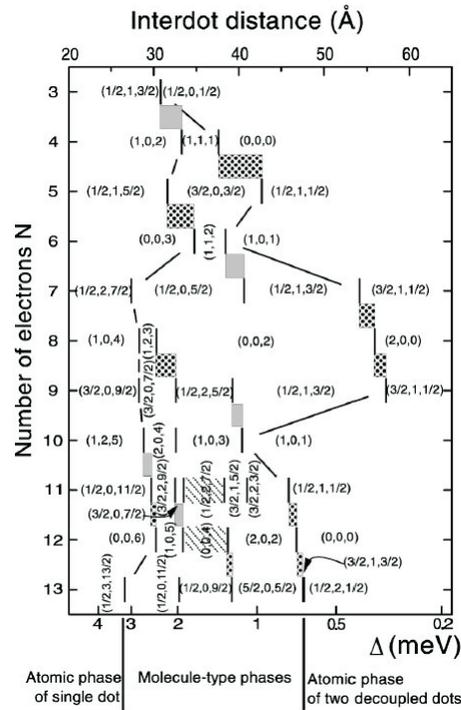


Figura 1.9: Diagrama das configurações eletrônicas de dois CQDs em função da distância entre os QDs. A região entre as linhas mostram as configurações moleculares. As áreas cinzas (pontilhadas) indicam o isospin (spin) blockade.

1.3 Estrutura da tese

Sabendo como as nano-estruturas são fabricadas e que os resultados experimentais indicam que a interação elétron-elétron é uma grandeza importante, nesta tese é feita uma análise da estrutura eletrônica de dois anéis quânticos acoplados (Capítulo 2) e das propriedades de transporte de um ponto quântico (Capítulo 3).

No capítulo 2 apresentamos os resultados para a estrutura eletrônica de dois CQRs, a qual foi obtida através de cálculos auto-consistentes utilizando-se a teoria do funcional densidade dependente de spin. Na seção 2.2 descrevemos a diferença entre o espectro de uma partícula de um ponto quântico e um anel quântico. A seção 2.3 é dedicada à descrição do modelo teórico utilizado para calcular a estrutura eletrônica dos anéis quânticos acoplados. E, finalmente, na seção 2.4 são apresentados os resultados para estrutura eletrônica dos CQRs em função do raio

dos anéis e da distância entre eles. Concluímos a partir desta parte do trabalho que os anéis quânticos acoplados possuem uma estrutura eletrônica diferente da estrutura eletrônica dos pontos quânticos acoplados e que novas configurações moleculares são encontradas para este sistema.

No capítulo 3 usamos a teoria quântica de espalhamento, que é geralmente utilizada nos estudos de colisões elétron-átomo e elétron-molécula, para determinar o transporte eletrônico dependente de spin em pontos quânticos semicondutores. Através da teoria de espalhamento incluímos diretamente os efeitos de muitos corpos, como o potencial de interação direto e de troca. Além disso, estudamos o espalhamento inelástico (multi-canal), o qual descreve as transições eletrônicas que acontecem dentro do ponto quântico devido à presença do elétron incidente. Na seção 3.2 descrevemos como é a interação entre o elétron incidente e o ponto quântico com N -elétrons, e em seguida, na seção 3.3 determinamos a equação de Lippmann-Schwinger para este sistema. Os efeitos e as conseqüências da condição de contorno são discutidos na seção 3.4, onde relacionamos a matriz de espalhamento T com a condutância. Na seção 3.5 aplicamos este modelo teórico ao ponto quântico com um único elétron confinado. Finalmente apresentamos os resultados obtidos na seção 3.6. As propriedades de transporte obtidas através da teoria de espalhamento podem ajudar a entender os resultados experimentais e também podem ser utilizadas para novas aplicações.

Capítulo 2

Estrutura eletrônica de anéis quânticos acoplados

2.1 Introdução

O objetivo deste capítulo é estudar os efeitos da interação elétron-elétron nas configurações do estado fundamental de dois anéis quânticos acoplados¹, onde o tunelamento entre os anéis é incluído. Nós utilizamos o formalismo de Kohn-Sham para calcular a estrutura eletrônica e, deste modo, é natural interpretar os resultados em termos dos níveis de uma partícula juntamente com a regra de Hund, como é feito em átomos. O estado fundamental varia de acordo com a distância entre os anéis e os seus respectivos raios, sendo assim construímos um diagrama de fases (configurações) eletrônicas em função destas grandezas. A energia de adição também foi calculada porque esta grandeza pode ser medida através dos experimentos de tunelamento de um elétron, como já foi feito para CQDs [28].

¹Esta parte de trabalho foi desenvolvida em colaboração com os professores F. M. Peeters e B. Partoens da Universidade da Antuérpia, Bélgica.

2.2 Anéis quânticos: níveis de uma partícula

Através dos níveis de energia de uma partícula podemos entender de forma qualitativa o que irá acontecer ao considerarmos os CQRs com vários elétrons. Ou seja, podemos preencher os níveis de uma partícula usando a regra de Hund, a qual diz que para minimizar a energia do sistema o spin deve ser maximizado. Entretanto, nem sempre esta regra é válida, como foi observado para CQDs [29]. Obviamente, a Regra de Hund é uma forma simples de entender a estrutura eletrônica de átomos ou moléculas artificiais, e desta forma o uso de uma teoria de muitos corpos se faz necessária. O espectro de uma partícula do anel quântico é diferente do ponto quântico e os potenciais que descrevem estes dois sistemas teoricamente são $V(r) = V_{QD}(r) = \frac{m^*\omega_0^2 r^2}{2}$ para QD e $V(r) = V_{QR}(r) = \frac{m^*\omega_0^2 (r-r_0)^2}{2}$ para QR, sendo r_0 o raio do anel. Nós adotamos este potencial para o QR, pois foi demonstrado que os resultados experimentais [32] são melhor explicados teoricamente utilizando esta forma para descrever o QR [33]. A equação de Schrödinger para os dois sistemas é:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

No caso de QDs a solução é exata [34, 35], e as funções de onda e respectivas auto-energias são dadas por:

$$\phi_{k,l}(r, \theta) = \frac{1}{a_0} \sqrt{\frac{k!}{\pi(k+|l|)!}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^{|l|} L_k^{|l|}\left(\frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-r^2/2a_0^2} e^{il\theta} \quad (2.2)$$

e

$$E_{k,l} = \hbar\omega_0 (2k + |l| + 1) \quad (2.3)$$

onde $L_k^{|l|}$ denota o polinômio de Laguerre generalizado [36] e $a_0 = \sqrt{\hbar/m^*\omega_0}$.

No caso do anel quântico não existe uma solução analítica para a Eq. (2.1) e os níveis de energia do QR são obtidos expandindo a função de onda $\psi(\mathbf{r})$ na base de Fock-Darwin (Eq. (2.2)), ou seja,

$$\psi(r, \theta) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} c_{k,l} \phi_{k,l}(r, \theta) \quad (2.4)$$

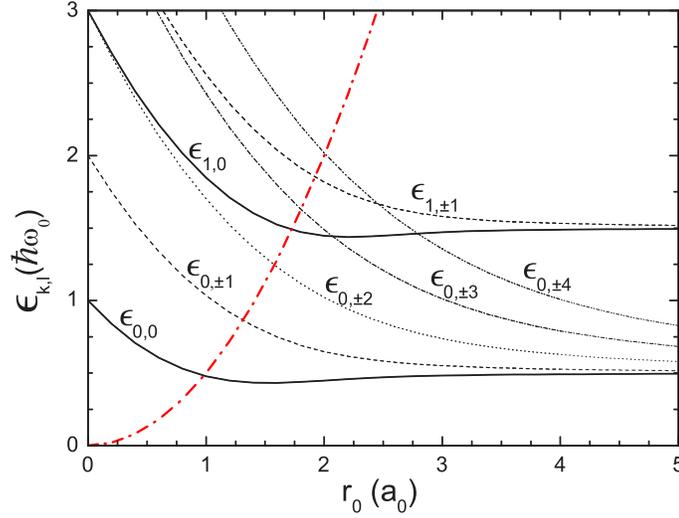


Figura 2.1: Estrutura de níveis de uma partícula variando o tamanho do raio do anel r_0 . A curva vermelha indica a altura do potencial no centro do anel $V = m^* \omega_0^2 r_0^2 / 2$.

Substituindo a Eq. (2.4) na Eq. (2.1) com $V(r) = V_{QR}(r)$, multiplicando-a por $\phi_{k',l'}^*(r, \theta)$ e integrando-a em todo plano obtemos:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \int d^2\mathbf{r} \phi_{k',l'}^*(r, \theta) \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{QR}(r) \right] \phi_{k,l}(r, \theta) c_{k,l} = E c_{k',l'} \quad (2.5)$$

Esta equação pode ser escrita na forma matricial, com os elementos de matriz dados por:

$$H_{kl,k'l'} = \int d^2\mathbf{r} \phi_{k',l'}^*(r, \theta) \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{QR}(r) \right] \phi_{k,l}(r, \theta) \quad (2.6)$$

Como o potencial do QR só depende de r , podemos resolver a parte angular resultando em:

$$H_{kl,k'l} = \int_0^{\infty} r dr \varphi_{k',l}^*(r) \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l^2}{r^2} \right) + V_{QR}(r) \right] \varphi_{k,l}(r) \quad (2.7)$$

onde

$$\varphi_{k,l}(r) = \frac{1}{a_0} \sqrt{\frac{k!}{(k+|l|)!}} \left(\frac{r}{a_0} \right)^{|l|} L_k^{|l|} \left(\frac{r^2}{a_0^2} \right) e^{-r^2/2a_0^2} \quad (2.8)$$

As auto-energias e as auto-funções são determinadas diagonalizando a matriz cujos elementos são dados pela Eq. (2.7) para cada diferente momentum angular l . Os níveis de energia obtidos para o anel quântico estão mostrados na Fig. 2.1.

Quando $r_0 = 0$ recuperamos os níveis de energia do ponto quântico. Em comparação com os resultados do ponto quântico, uma diferença importante aparece no caso do anel quântico, que é a quebra da degenerescência dos níveis $\epsilon_{0,\pm 2}$ e $\epsilon_{1,0}$, para $r_0 > 0$. Com o aumento do raio do anel, a diferença de energia $\epsilon_{1,0} - \epsilon_{0,\pm 2}$ aumenta e tende a uma constante para grandes valores de r_0 . Isto indica que mesmo na ausência de campos externos, o estado fundamental do anel quântico pode ser muito diferente do ponto quântico. Notamos também que os níveis exibem um mínimo em função do raio do anel para os orbitais com $l = 0$. A razão para este fato é que quando o raio do anel aumenta, uma transição do ponto quântico para o anel quântico acontece. Qualitativamente podemos entender este efeito observando a altura do potencial no centro do anel $m^*\omega_0^2 r_0^2/2$, que está mostrada na Fig. 2.1 pela curva vermelha.

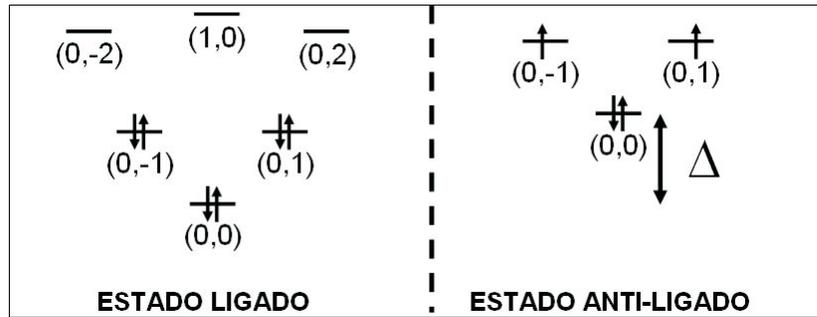


Figura 2.2: Esquema da representação da configuração eletrônica dos CQRs em função da estrutura de níveis de uma partícula. O lado esquerdo (direito) representa o estado ligado (anti-ligado). Os índices (k, l) designam os níveis de uma partícula do QR.

Usando os níveis de uma partícula juntamente com a regra de Hund podemos construir, de forma qualitativa, a estrutura eletrônica dos CQRs com vários elétrons. Na direção z os dois CQRs são acoplados por dois poços quânticos. Os níveis de uma partícula da direção z são dados pelos dois primeiros níveis de energia dos poços quânticos, os estados ligado e anti-ligado, que diferem entre

si por uma energia Δ . No plano (x, y) , para um valor fixo do raio do anel obtemos o espectro de uma partícula mostrado na Fig. 2.1. Desta maneira, os níveis de uma partícula para os CQRs são dados pela combinação dos níveis no plano (x, y) com os níveis da direção z , como mostrado na Fig. 2.2. Do lado esquerdo, temos o estado ligado mais a energia no plano (x, y) e do lado direito, o estado anti-ligado, que difere do estado ligado pela energia Δ , mais os níveis do plano (x, y) . Na Fig. 2.2 é mostrado um exemplo do estado fundamental para 10 elétrons descrito em termos dos níveis de uma partícula. Podemos observar que os níveis $(0, 0)$, $(0, 1)$ e $(0, -1)$ do estado ligado e $(0, 0)$ do anti-ligado são preenchidos com um elétron de spin para cima e outro para baixo de acordo com o princípio de exclusão de Pauli. Os dois últimos elétrons são colocados da seguinte maneira: um no estado $(0, -1)$ e outro no $(0, 1)$ ambos com spin para cima no estado anti-ligado, maximizando desta forma o spin total de acordo com a regra de Hund.

No decorrer desta tese, será utilizado o esquema mostrado na Fig. 2.2 para apresentar a configuração eletrônica dos CQRs em termos dos níveis de uma partícula.

2.3 Modelo teórico

Um dos interesses em estudar QRs acoplados está no fato de que variando o tamanho e a geometria destas nano-estruturas semicondutoras é possível modificar e controlar as suas propriedades eletrônicas, magnéticas e óticas. Também nestes sistemas, existe uma competição entre a interação eletrônica *inter-ring* (entre os elétrons dos diferentes anéis) e *intra-ring* (entre os elétrons do mesmo anel), as quais permitem explorar os efeitos da correlação eletrônica nestes sistemas. Como dito anteriormente, na direção z os QRs são acoplados por dois poços quânticos. Por causa da barreira finita entre os dois poços quânticos, o estado de mais baixa energia se separa em um estado ligado simétrico e um anti-ligado antissimétrico (Fig. 2.3). A relação entre a diferença de energia destes

dois estados em função da distância pode ser ajustada por uma função exponencial $\Delta = 22.86 \exp[-d(\text{\AA})/13.455]$ meV [29], quando o tamanho de ambos poços é $W = 120 \text{\AA}$ e a altura da barreira entre os poços é igual a $V_0 = 250$ meV. Estes valores correspondem às dimensões típicas utilizadas em experimentos [28]. Os parâmetros que adotamos para o GaAs são: massa efetiva $m^* = 0.067m_e$ e a constante dielétrica $\epsilon_0^* = 12.4$. Usando estes parâmetros obtemos um raio de Bohr efetivo $a_B^* = 9.79$ nm.

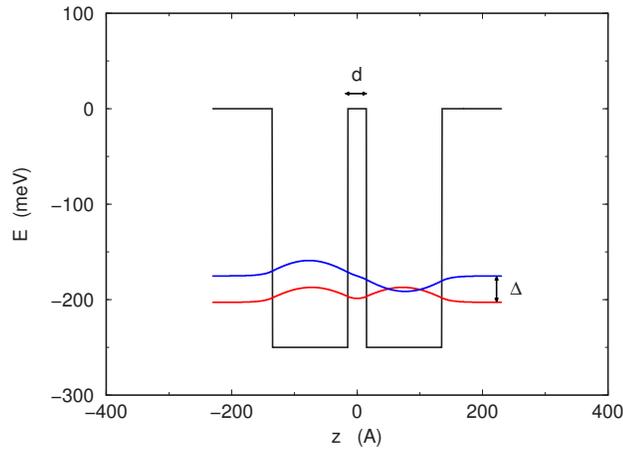


Figura 2.3: Potencial de confinamento na direção z . A curva vermelha (azul) representa o estado ligado (anti-ligado). Os estados ligado e anti-ligado diferem entre si pela energia Δ .

Para determinar o estado fundamental dos CQRs nós usamos a teoria do funcional densidade dependente de spin, que está descrita no Apêndice A. Este método também foi usado em CQDs com bastante sucesso [29]. A energia do estado fundamental e a densidade $\rho(\mathbf{r})$ são expressas em termos dos orbitais Kohn-Sham dados por:

$$\psi_{kl\sigma}(\mathbf{r}) = \exp(-il\theta)\varphi_{k,l}^{\sigma}(r)Z(z) \quad (2.9)$$

os quais são auto-estados da componente z do momentum angular $-l$ e satisfazem a seguinte equação de Kohn-Sham [29]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V_{QR}(r) + V_H^{intra}(r) + V_H^{inter}(r) \right. \\ \left. + V(z) + V_{xc\sigma}(r) \right] \varphi_{k,l}^{\sigma}(r)Z(z) = \epsilon_{k,l}^{\sigma} \varphi_{k,l}^{\sigma}(r)Z(z) \quad (2.10)$$

sendo σ a componente z do spin.

A densidade total do sistema é $\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \sum_i |\varphi_{k,l}^{\sigma}(r, \theta)|^2$. Considerando os dois QRs idênticos, ou seja, a densidade de cada um como sendo a metade da total, aproximamos a densidade na direção z por funções δ . A equação de Kohn-Sham também inclui os potenciais de Hartree *intra-ring* e *inter-ring*, dados por:

$$V_H^{intra}(r) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon_0^*} \int r' dr' \frac{\rho(r')/2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.11)$$

$$V_H^{inter}(r) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon_0^*} \int r' dr' \frac{\rho(r')/2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}' + \mathbf{d}|} \quad (2.12)$$

onde $d = |\mathbf{d}|$ é a distância entre os QRs. A energia de troca e correlação, a qual na aproximação local de densidade de spin (LSDA²) é dada pelo funcional de Tanatar-Ceperley [37]. Deste modo, a energia do estado fundamental para o sistema acoplado é obtida através de

$$\begin{aligned} E &= \sum_{\sigma\alpha} \varepsilon_{\sigma,\alpha} - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (V_H^{intra}(\mathbf{r}) + V_H^{inter}(\mathbf{r})) \rho(\mathbf{r}) \\ &\quad - \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} V_{xc\sigma}(\mathbf{r}) \rho_{\sigma}(\mathbf{r}) + 2E_{xc}[\rho, \xi] \end{aligned} \quad (2.13)$$

Para resolver as equações de Kohn-Sham, expandimos as funções $\varphi_{k,l}^{\sigma}(r)$ na representação de Fock-Darwin

$$\varphi_{k,l}^{\sigma}(r) = \varphi_{k,l}(r) \chi_{\sigma} \quad (2.14)$$

onde $\varphi_{k,l}(r)$ é dada pela Eq. (2.8) e χ_{σ} é a função de spin.

Numericamente as equações de Kohn-Sham são resolvidas auto-consistentemente. Para isso, primeiramente temos que definir o número total de elétrons. Depois os orbitais de Kohn-Sham são expandidos na base de Fock-Darwin Eq. (2.14), escolhendo diferentes possíveis combinações para o estado fundamental. Para cada valor do momentum angular l é escolhido k_{max} coeficientes e as funções de onda são inicializadas no limite em que a interação elétron-elétron é nula. Com estas funções de onda definidas, as densidades com spin para cima e spin para baixo são calculadas. Desta forma, podemos encontrar os elementos de matriz

²LSDA=Local Spin Density Approximation.

através da Eq. (2.10). Então, temos para cada diferente spin, uma matriz constituída por blocos quadrados com tamanho k_{max} para cada valor de l . Estas matrizes são diagonalizadas para se obter os níveis de energia e as novas funções de onda. Os níveis de energia mais baixa de spin para cima e para baixo são preenchidos e a energia total é obtida pela equação (2.13). As correspondentes funções de onda são usadas para obter a nova densidade. Este processo é realizado até que a densidade do passo N seja igual a densidade do passo anterior $N - 1$, em uma certa precisão escolhida a priori.

2.4 Resultados

Nesta seção apresentamos os resultados obtidos para a estrutura eletrônica de dois anéis quânticos acoplados. A energia do estado fundamental do sistema e sua correspondente configuração eletrônica são determinadas comparando as diferentes energias totais para diferentes possíveis configurações. Nas figuras referentes a estrutura eletrônica dos CQRs, utilizamos três números quânticos para descrever os níveis eletrônicos (S_z, M_z, I_z) , onde S_z é o spin, M_z é o momento angular e I_z é o isospin, o qual é a diferença entre o número de elétrons no estado ligado e de elétrons no estado anti-ligado dividido por dois. Uma representação esquemática que está inserida nos gráficos, mostra qual é a disposição dos elétrons em termos dos níveis de energia de uma partícula, onde o lado esquerdo designa o estado ligado e o lado direito o estado anti-ligado, como exemplificado na Fig. 2.2.

Na Fig. 2.4, apresentamos a energia do estado fundamental para QRs acoplados com 10 elétrons em função do raio do anel r_0 , para uma distância entre os anéis fixa $d = 26 \text{ \AA}$, a qual corresponde à energia de tunelamento $\Delta = 3.31 \text{ meV}$. Nós encontramos 4 distintas configurações (fases) para esta intensidade de tunelamento. Estas são as configurações: $(S_z, M_z, I_z) = (1, 0, 3)$, $(2, 0, 4)$, $(1, 2, 4)$ e $(0, 0, 5)$. As mudanças nas configurações ocorrem em $r_0 = 0.32$, 0.58 , e $0.83 a_0$. A fase $(1, 0, 3)$, para $r_0 < 0.32$, é consistente com o resultado obtido para dois pontos quânticos acoplados [29]. Aumentando-se r_0 , mais elétrons se transferem

do estado anti-ligado para o estado ligado. Também notamos que, a existência da fase $(2,0,4)$ é um resultado dos efeitos de troca. Embora a energia de uma partícula $\epsilon_{0,2}$ seja menor que $\epsilon_{1,0}$ como mostrado na Fig. 2.1, o 9^o elétron no estado ligado ocupa o estado $(1,0)$ até sua diferença de energia superar a energia de troca. Para grandes valores dos raios dos anéis, todos os elétrons se transferem para o estado ligado. A Fig. 2.5 ilustra (a) a distribuição de densidade eletrônica total e (b) a distribuição de densidade polarizada de spin para CQRs com diferentes raios dos anéis $r_0 = 0, 0.5, 0.7$ e $2.0 a_0$. Onde cada diferente raio está relacionado com uma diferente configuração mostrada na Fig. 2.4. Identificamos duas novas fases originárias da estrutura eletrônica do QR, $(1,2,4)$ e $(0,0,5)$ as quais não foram observadas para CQDs [29]. A convergência dos níveis de uma partícula $\epsilon_{0,l}$ (para $l=0, \pm 1, \dots$) quando o raio do anel é grande, leva ao aparecimento destas duas novas fases.

Podemos também investigar os efeitos da distância entre os anéis no estado fundamental para valores fixos dos raios dos anéis. A Fig. 2.6 mostra como uma

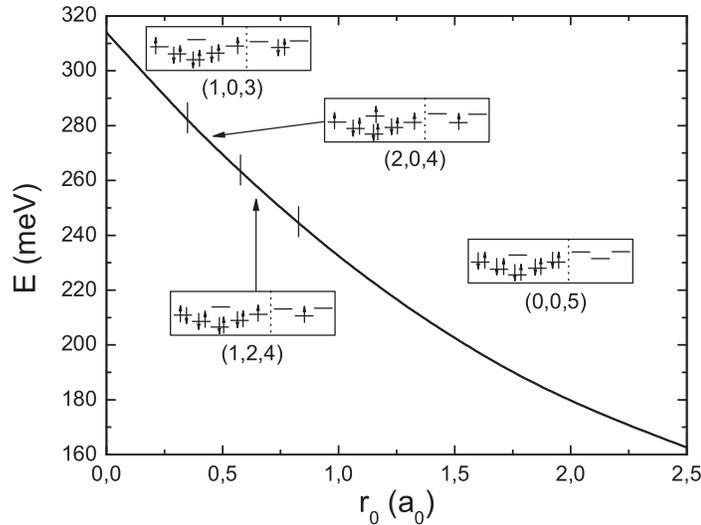


Figura 2.4: Energia do estado fundamental para CQRs com 10 elétrons em função do raio do anel r_0 , com energia de tunelamento fixa $\Delta = 3.31$ meV e $\hbar\omega_0 = 5$ meV.

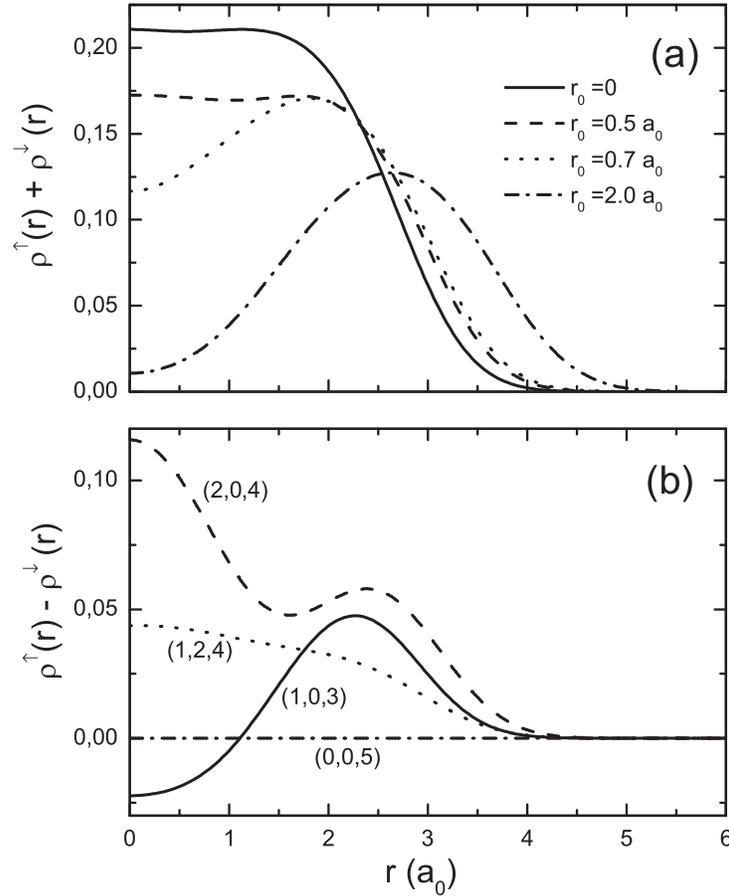


Figura 2.5: (a) Distribuição de densidade eletrônica total (b) Distribuição de densidade polarizada de spin para CQRs com diferentes raios dos anéis $r_0 = 0, 0.5, 0.7$ e $2.0 a_0$.

particular configuração eletrônica depende da distância entre os anéis (curva tracejada em preto). Notamos que as diferentes configurações se cruzam e aquela que antes possuía energia mais baixa passa a ter energia mais alta, a partir de uma certa distância entre os anéis. O estado fundamental é encontrado comparando-se todas configurações possíveis para o CQRs e vendo qual possui energia mais baixa. Esta figura também mostra a dependência da energia do estado fundamental (curva sólida em vermelho) e as respectivas configurações eletrônicas dos anéis quânticos acoplados em função da distância entre os dois anéis. Para valores pequenos do raio do anel $r_0 = 0.5 a_0$, como mostrado na Fig. 2.6(a), as configurações

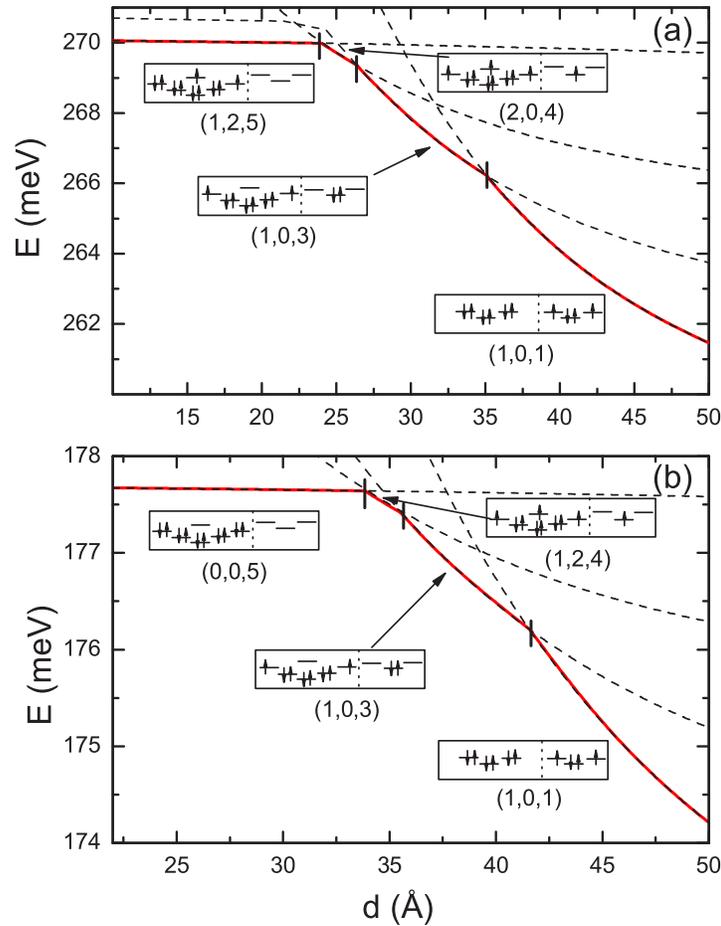


Figura 2.6: Energia do estado fundamental (linha sólida vermelha) para CQRs com 10 elétrons em função da distância entre os anéis para diferentes raios dos anéis (a) $r_0 = 0.5 a_0$ e (b) $r_0 = 2.0 a_0$. A curva tracejada preta mostra como a energia total de cada particular configuração varia em função da distância entre os anéis.

do estado fundamental são similares às encontradas em CQDs [29]. Para um valor maior do raio do anel, $r_0 = 2.0 a_0$ e para valores pequenos da distância entre os anéis (grandes valores para a energia de tunelamento Δ), todos os elétrons ocupam o estado ligado, como mostrado na Fig. 2.6(b). Com o aumento da distância entre os anéis, a energia Δ diminui e quando esta fica menor que a diferença de energia entre os estados ligados, o elétron pula para o nível de energia mais baixa

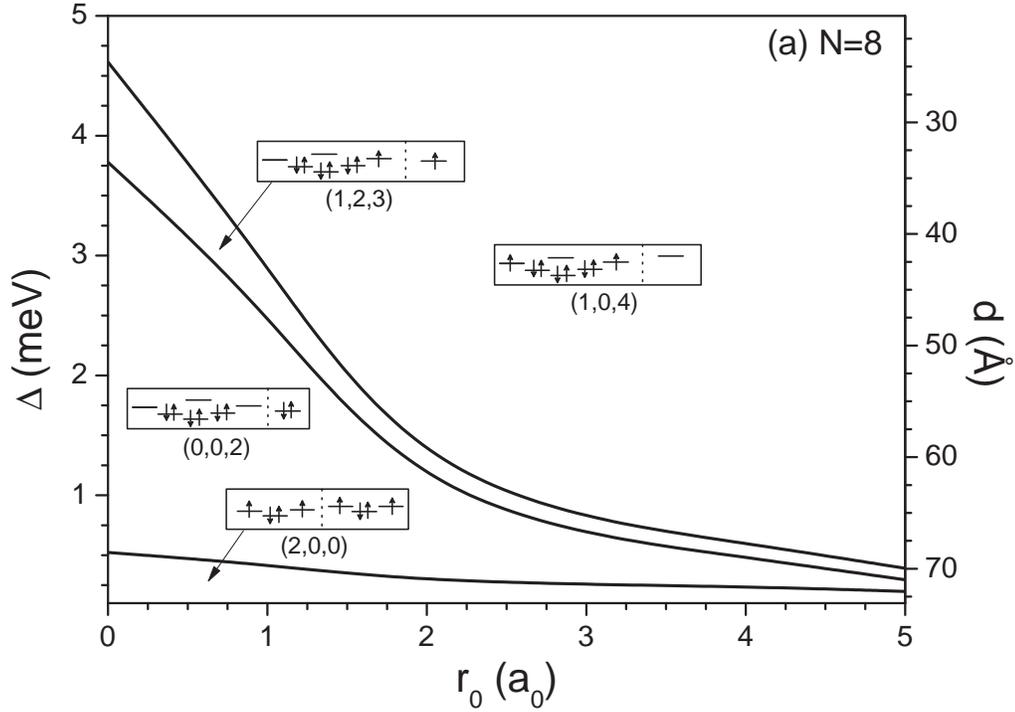


Figura 2.7: Diagrama de fases eletrônicas em função do raio do anel r_0 e da distância entre os anéis d , para 8 elétrons com $\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$.

do estado anti-ligado e o estado fundamental dos CQRs se altera. Comparando as duas figuras, podemos ver que as mesmas fases são encontradas para CQDs e CQRs para grandes valores de d . Entretanto, para pequenos valores de d , duas novas fases são encontradas para CQRs, são estas $(0, 0, 5)$ e $(1, 2, 4)$.

Para entendermos o que acontece com o estado fundamental de dois anéis quânticos acoplados fizemos um diagrama de fases (configurações) eletrônicas variando r_0 e d para 8, 9, 10, 11, 12 e 13 elétrons com $\hbar\omega_0 = 5\text{ meV}$ e estes resultados estão apresentados nas Fig.(2.7, 2.8, 2.9, 2.10, 2.11 e 2.12), respectivamente. Para $N = 8$ quatro diferentes fases são encontradas como mostrado na Fig. 2.7. Para r_0 fixo, existe uma fase tipo atômica $(2, 0, 0)$ para valores pequenos de Δ , onde a distância entre os anéis é grande e estes ficam praticamente desacoplados. Para valores grandes de Δ os dois anéis são fortemente acoplados e agem como um único anel, resultando em outra fase do tipo atômica $(1, 0, 4)$. Existem duas fases moleculares: $(0, 0, 2)$ e $(1, 2, 3)$ para distâncias intermediárias

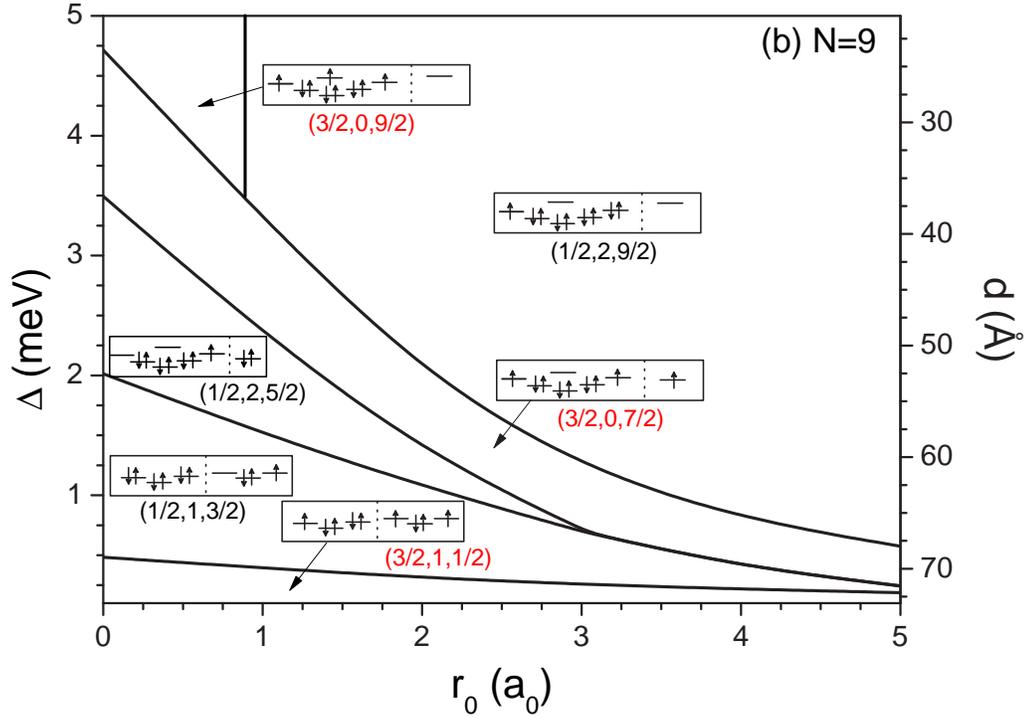


Figura 2.8: Diagrama de fases eletrônicas em função do raio do anel r_0 e da distância entre os anéis d , para 9 elétrons com $\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$.

entre os anéis, similares às encontradas anteriormente para CQDs [29]. Quando o valor de Δ é diminuído, mais elétrons se transferem do estado anti-ligado para o estado ligado, ocasionando transições nas configurações. Como os níveis de uma partícula $\epsilon_{0,l}$ (para $l = 0, \pm 1$, e ± 2) decrescem com o aumento do raio do anel r_0 e convergem quando o raio do anel é grande, a fase do tipo atômica $(1, 0, 4)$ é aumentada para QRs fortemente acoplados. Com isso, podemos entender que o efeito do tunelamento é aumentado para grandes valores de r_0 . Este fato é esclarecido quando investigamos as transições nas configurações com o aumento de r_0 para um valor fixo de Δ . Em $\Delta = 2\text{ meV}$ ($d = 32.8\text{Å}$), *i.e.*, ocorrem as transições $(0, 0, 2) \rightarrow (1, 2, 3) \rightarrow (1, 0, 4)$, que correspondem às transições de isospin $I_z = 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$ onde o valor máximo é alcançado se r_0 é grande. O estado magnético, *i.e.* o valor M_z , também pode ser manipulado variando Δ e/ou r_0 .

Novas fases aparecem quando $N = 9$, como pode ser observado na Fig. 2.8. Encontramos a fase $(3/2, 0, 9/2)$, para $r_0 < 0.89 a_0$, o que é consistente com o

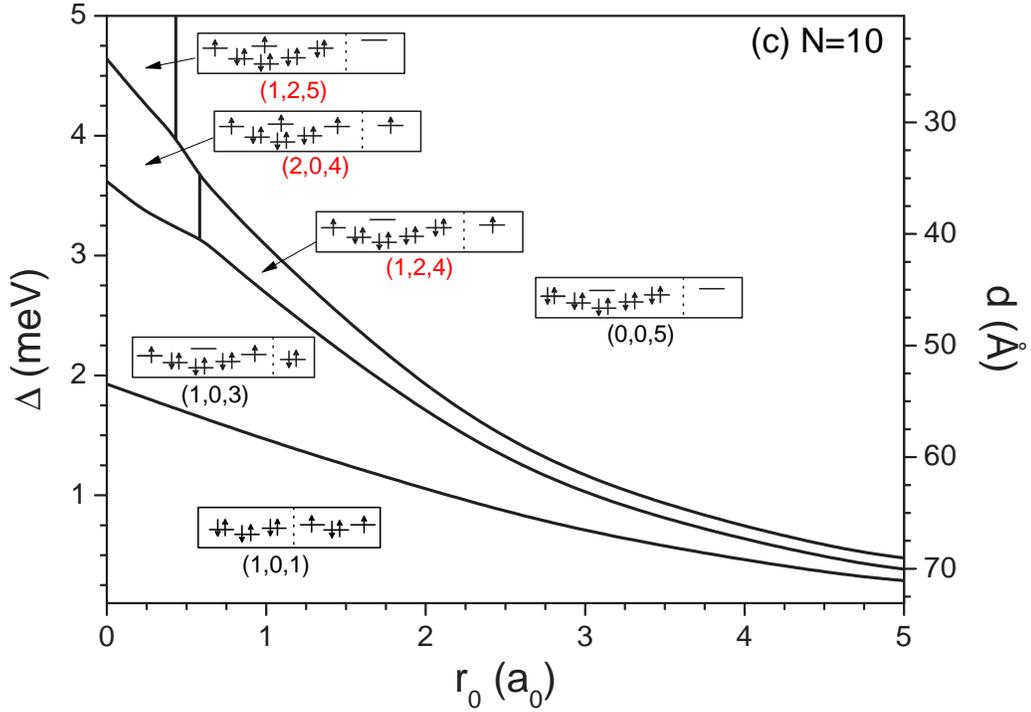


Figura 2.9: Diagrama de fases eletrônicas em função do raio do anel r_0 e da distância entre os anéis d , para 10 elétrons com $\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$.

resultado obtido para CQDs [29]. Uma fase tipo atômica $(1/2, 2, 9/2)$ aparece para $r_0 > 0.89 a_0$ no regime de tunelamento forte. O surgimento da nova fase $(1/2, 2, 9/2)$ é uma consequência do levantamento da degenerescência dos níveis de uma partícula $\epsilon_{1,0}$ e $\epsilon_{0,\pm 2}$ no estado ligado. Quando o raio do anel aumenta, $\epsilon_{1,0} - \epsilon_{0,\pm 2}$ aumenta e quando esta diferença de energia supera a energia de troca devido à regra de Hund, o estado $\epsilon_{0,\pm 2}$ se torna energeticamente mais favorável que $\epsilon_{1,0}$. Conseqüentemente, o estado fundamental passa de $(3/2, 0, 9/2)$ para $(1/2, 2, 9/2)$.

Outro novo resultado para CQRs com 9 elétrons é o desaparecimento do estado $(1/2, 2, 5/2)$ para $r_0 > 3.04 a_0$. Tal fato pode ser entendido da seguinte maneira: (i) a diferença de energia $\epsilon_{0,\pm 1} - \epsilon_{0,0}$ no estado anti-ligado é menor para valores grandes de r_0 (esta é muito menor que $\epsilon_{0,\pm 2} - \epsilon_{0,\pm 1}$); e (ii) a existência da fase $(3/2, 0, 7/2)$ é devida ao ganho da energia pelo potencial de troca em ter dois spins alinhados em $\epsilon_{0,-2}$ e $\epsilon_{0,+2}$ no estado ligado. Para $r_0 > 3.04 a_0$ este ganho

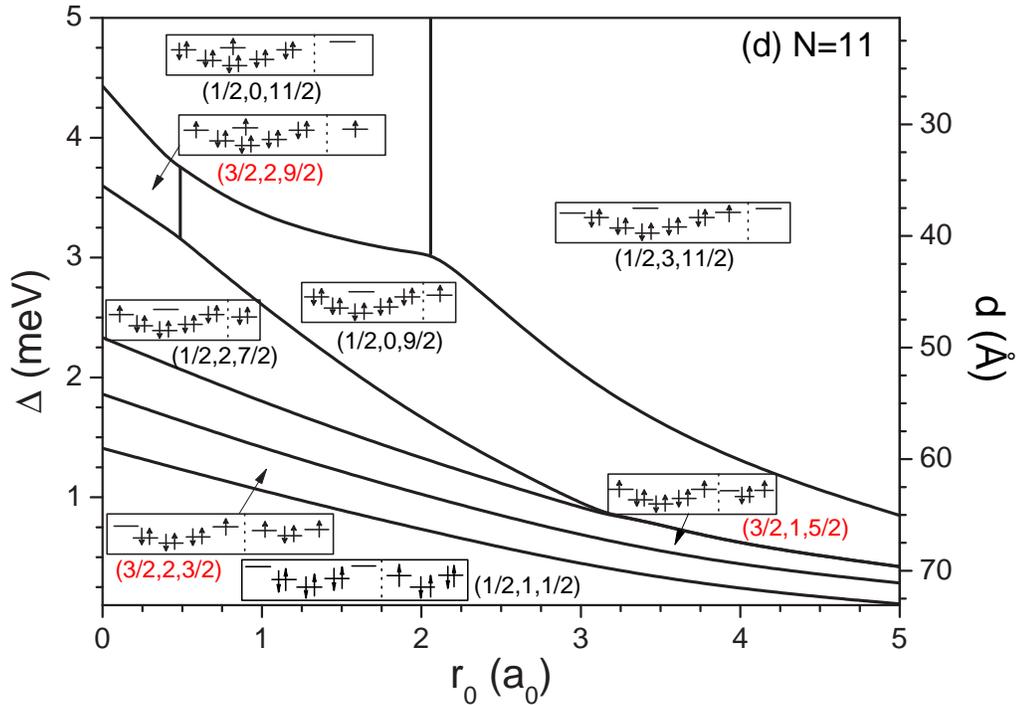


Figura 2.10: Diagrama de fases eletrônicas em função do raio do anel r_0 e da distância entre os anéis d , para 11 elétrons com $\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$.

por energia por troca fica maior que $\epsilon_{0,\pm 1} - \epsilon_{0,0}$. Com a diminuição de Δ , um dos elétrons nos níveis $\epsilon_{0,\pm 2}$ no estado ligado pula para o estado anti-ligado e o outro elétron o segue levando a transição para $(3/2, 0, 7/2)$ diretamente para $(1/2, 1, 3/2)$. Esta é uma clara manifestação do efeito da interação elétron-elétron em CQRs.

Nós encontramos seis diferentes configurações (fases) para o estado fundamental em CQRs com 10 elétrons (Fig. 2.9). As fases $(1, 2, 5)$ e $(2, 0, 4)$ para valores pequenos de r_0 são consistentes com o resultado obtido para CQDs [29]. As transições abruptas de $(1, 2, 5)$ para $(0, 0, 5)$ em $r_0 = 0.426 a_0$ e de $(2, 0, 4)$ para $(1, 2, 4)$ em $r_0 = 0.575 a_0$ também originam-se do levantamento da degenerescência dos níveis de uma partícula $\epsilon_{1,0}$ e $\epsilon_{0,\pm 2}$ no estado ligado. Em ambas transições, o número quântico isospin I_z não muda. Entretanto, uma transição de $(0, 0, 5)$ para $(2, 0, 4)$ é possível para $0.426 < r_0 < 0.575 a_0$ onde ocorre a transição do spin total $S_z = 0$ para o spin total $S_z = 2$ associada com a mudança de dois elétrons. A nova fase molecular $(1, 2, 4)$ é encontrada somente para CQRs.

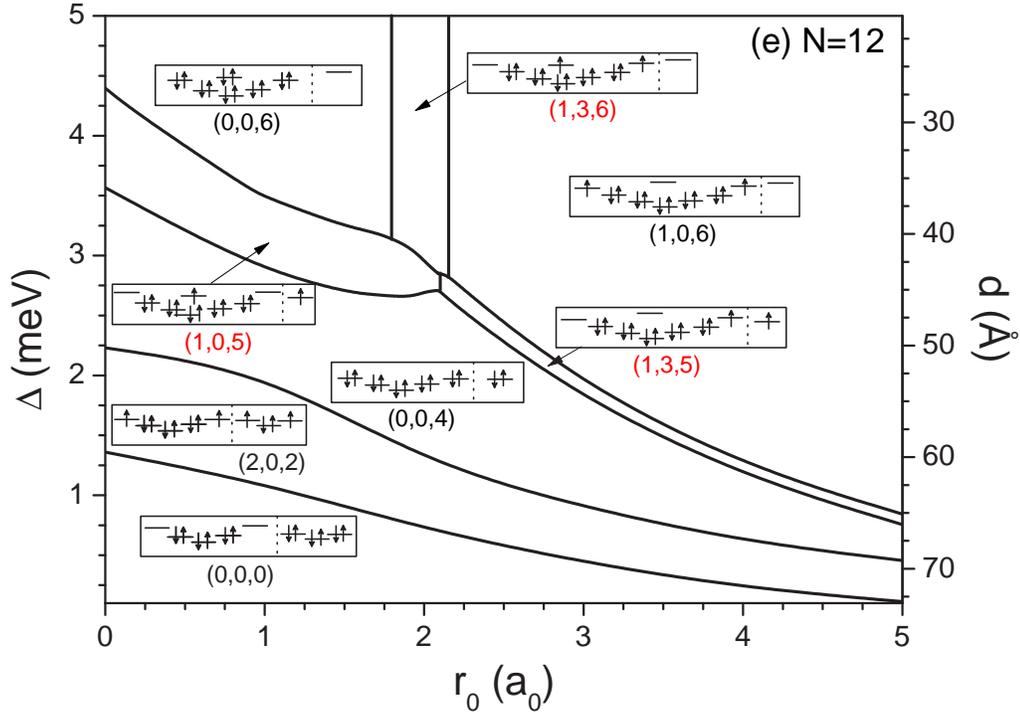


Figura 2.11: Diagrama de fases eletrônicas em função do raio do anel r_0 e da distância entre os anéis d , para 12 elétrons com $\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$.

Para 11 elétrons o número de possíveis estados fundamentais aumenta para 8 (Fig. 2.10). Dentre estas, a fase tipo atômica $(1/2, 3, 11/2)$ e a fase tipo molecular $(1/2, 0, 9/2)$, aparecem somente para um valor finito do raio do anel. A transição de $(1/2, 0, 11/2)$ para $(1/2, 3, 11/2)$ em $r_0 = 2.05 a_0$ é associada com a transferência de um elétron do estado ligado que ocupava o nível $\epsilon_{1,0}$ para $\epsilon_{0,\pm 3}$. Isto é determinado pelo cruzamento da energia de uma partícula dos níveis em $r_0 = 2.07 a_0$, como pode ser visto na Fig. 2.1. Notamos também que a fase tipo molecular $(1/2, 2, 7/2)$ é completamente suprimida para grandes valores do raio do anel ($r_0 > 3.17 a_0$). Um similar fenômeno também foi observado no caso $N = 9$, e é uma consequência da diferença de energia $\epsilon_{0,\pm 1} - \epsilon_{0,0}$ no estado anti-ligado ficar menor que o ganho por troca na fase $(3/2, 1, 5/2)$, para grandes valores de r_0 . Também observamos a estabilização da fase tipo molecular $(1/2, 0, 9/2)$ para um valor do raio do anel intermediário, onde a energia de tunelamento Δ leva a um cruzamento do nível mais baixo $\epsilon_{0,0}$ no estado anti-ligado com o nível $\epsilon_{0,\pm 3}$ no

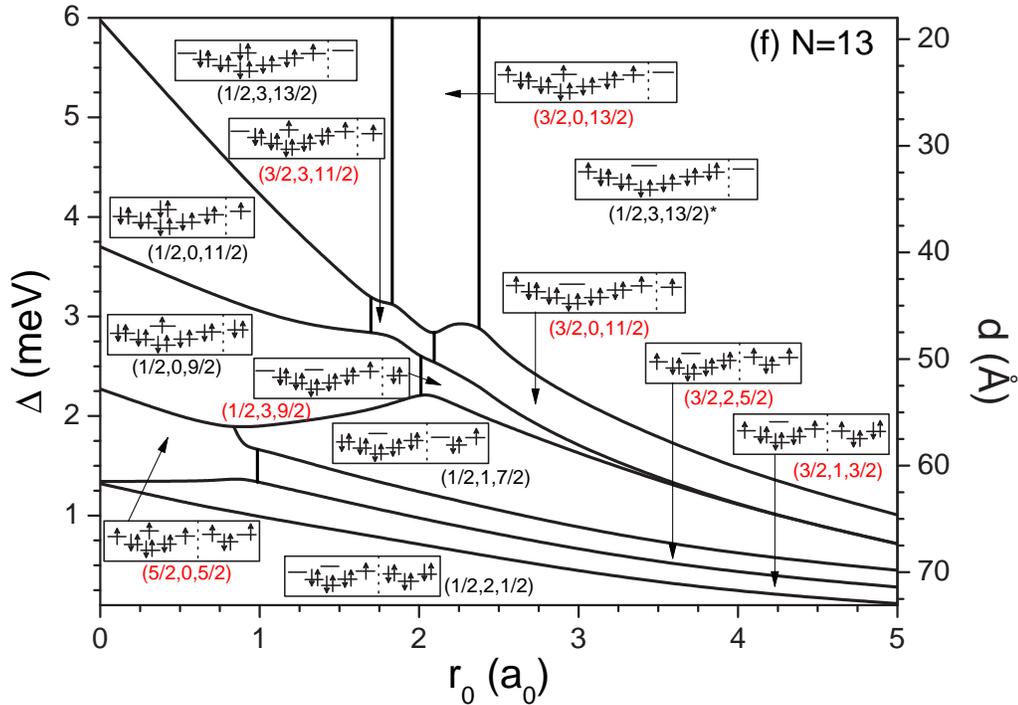


Figura 2.12: Diagrama de fases eletrônicas em função do raio do anel r_0 e da distância entre os anéis d , para 13 elétrons com $\hbar\omega_0 = 5meV$.

estado ligado. O estado anti-ligado mais baixo $\epsilon_{0,0}$ é quase reto com o aumento de r_0 , enquanto que o nível $\epsilon_{0,\pm 3}$ decresce rapidamente. Como consequência a fase $(1/2, 0, 9/2)$ com um elétron no estado anti-ligado $\epsilon_{0,0}$ é aumentada.

Quando observamos as configurações eletrônicas para 12 elétrons percebemos que dentre as 8 configurações encontradas apenas 3 destas $(1, 3, 6)$, $(1, 0, 6)$ e $(1, 3, 5)$, aparecem somente em CQRs. A fase intermediária $(1, 3, 6)$ se deve aos efeitos de muitos-corpos e não poderia ser prevista através dos níveis de uma partícula, enquanto que a fase $(1, 0, 6)$ ocorre devido ao cruzamento entre os níveis de uma partícula $\epsilon_{0,\pm 3}$ e $\epsilon_{1,0}$. Ao diminuirmos a energia de tunelamento Δ um elétron do estado ligado passa para o estado anti-ligado e a fase $(1, 3, 5)$ aparece da mudança tanto de um elétron em $(1, 3, 6)$ quanto em $(1, 0, 6)$.

O número de possíveis fases aumenta para 13 quando os CQRs possuem 13 elétrons (Fig. 2.12). Da esquerda para direita no topo desta figura, vemos 3 fases: $(1/2, 3, 13/2)$, $(3/2, 0, 13/2)$, e $(1/2, 3, 13/2)^*$ onde a estrela denota que, nesta nova fase dos CQRs, os níveis $\epsilon_{0,\pm 3}$ de maior momento angular são ocupados ao

invés dos níveis $\epsilon_{1,0}$, em contraste com a fase do CQDs $(1/2, 3, 13/2)$. A fase $(1/2, 3, 13/2)^*$ se deve ao fato do nível de uma partícula $\epsilon_{0,\pm 3}$ ficar mais baixo que o nível $\epsilon_{1,0}$ em um anel quântico. A fase intermediária $(3/2, 0, 13/2)$ se deve aos efeitos de muitos corpos. Diminuindo Δ , um dos elétrons no estado ligado, de qualquer umas das três configurações acima, pula para o mais baixo estado anti-ligado levando ao aparecimento das três fases do tipo molecular: $(1/2, 0, 11/2)$, $(3/2, 3, 11/2)$, e $(3/2, 0, 11/2)$.

Além disso, reduzindo a energia de tunelamento Δ , transições ocorrem de $(5/2, 0, 5/2)$ para $(3/2, 2, 5/2)$ em $r_0 = 0.99 a_0$ e de $(5/2, 0, 5/2)$ para $(1/2, 1, 7/2)$ com o aumento do raio do anel. Estas fases tipo molecular são uma consequência do levantamento da degenerescência dos níveis $\epsilon_{0,\pm 2}$ e $\epsilon_{1,0}$ para um valor finito do raio do anel, que também faz com que a fase $(3/2, 1, 3/2)$ fique mais estável. A fase tipo molecular $(1/2, 3, 9/2)$ fica instável para $r_0 > 3.89 a_0$ por causa do ganho por troca e correlação da fase vizinha $(3/2, 0, 11/2)$. Para CQRs com 13 elétrons, encontramos que as seguintes transições são provocadas pela mudança no estado de dois elétrons: $(1/2, 0, 9/2)$ para $(5/2, 0, 5/2)$, $(5/2, 0, 5/2)$ para $(1/2, 1, 7/2)$, e $(1/2, 1, 7/2)$ para $(3/2, 0, 11/2)$ onde ocorre a mudança no spin total com $|\Delta S_z| \geq 1$.

Experimentalmente é mais conveniente controlar o número dos elétrons [38,39] ocupando os CQRs. Então, calculamos a energia de adição como função do número de elétrons no regime de acoplamento forte, intermediário e fraco como mostrado na Fig. 2.13. Para $r_0 = 4.0 a_0$ e $\Delta = 1.6 \text{ meV}$ ($d = 35.8 \text{ \AA}$) os dois anéis são fortemente acoplados e atuam como um único anel, como mostrado na Fig. 2.13 (a). Para um único anel, as camadas fechadas são formadas em $N = 2, 6, 10, \dots$ resultando em picos na energia de adição para estes valores [40]. Através do gráfico inserido na Fig. 2.13 (a), notamos que I_z aumenta monotonicamente com o aumento de N porque todos os elétrons ficam no estado ligado. Quando reduzimos o raio do anel para $r_0 = 2.0 a_0$ e mantemos a mesma energia de tunelamento $\Delta = 1.6 \text{ meV}$, como mostrado na Fig. 2.13 (b), encontramos que os CQRs entram nas fases do tipo molecular para $N \geq 7$.

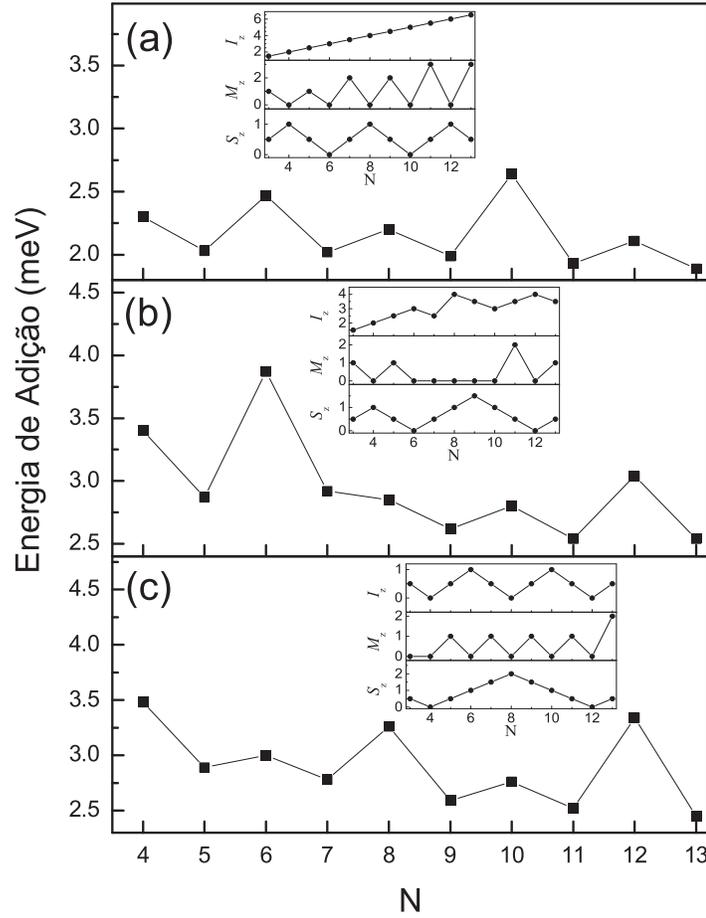


Figura 2.13: Energia de adição como função do número de elétrons em CQRs com (a) $r_0 = 4.0 a_0$ e $\Delta = 1.6$ meV; (b) $r_0 = 2.0 a_0$ e $\Delta = 1.6$ meV; e (c) $r_0 = 2.0 a_0$ e $\Delta = 0.15$ meV. Os gráficos inseridos mostram os correspondentes números quânticos: spin total S_z , momento angular M_z e isospin I_z .

O pico mostrado na energia de adição na Fig. 2.13 (b) quando $N = 6$ indica que o sistema transfere-se de uma camada fechada do tipo atômica $(0, 0, 3)$ para uma fase do tipo molecular $(1/2, 0, 5/2)$ para $N = 7$, onde existe um elétron no nível de energia mais baixo no estado anti-ligado $\epsilon_{0,0}$. De $N = 7$ para 8, I_z muda de $5/2$ para 4 como mostrado no gráfico inserido na Fig. 2.13(b) com uma mudança total de isospin $|\Delta I_z| = 3/2 > 1/2$, resultando em uma forte redução do pico de corrente por causa do *isospin blockade* [29,38]. No regime intermediário,

o estado fundamental depende fortemente do raio do anel e da distância entre estes. Isto é claramente refletido na energia de adição. O pico na energia de adição em $N = 12$ na Fig. 2.13(b) corresponde à fase tipo molecular $(0, 0, 4)$ onde existem 10 elétrons emparelhados no estado ligado e 2 elétrons emparelhados no estado anti-ligado $\epsilon_{0,0}$. Quando o raio do anel é mantido como uma constante,

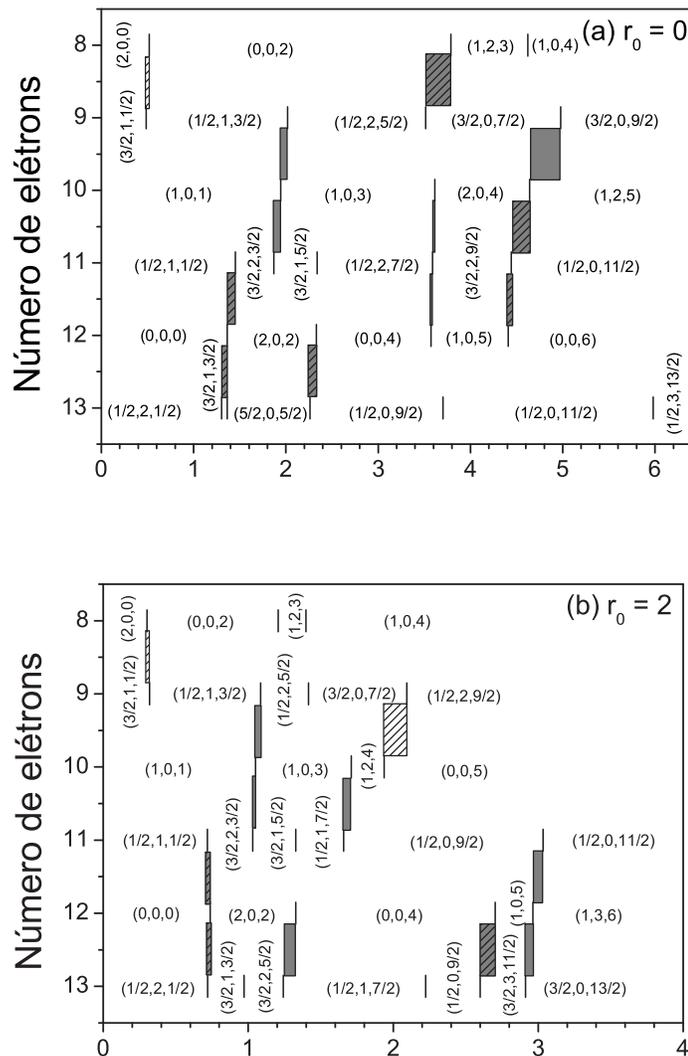


Figura 2.14: Diagrama de fases em função da distância entre os anéis, de $N = 8$ a 13 elétrons e para os valores do raio do anel (a) $r_0 = 0$ e (b) 2.0. As áreas hachuradas (cinza) marcam as regiões onde ocorrem o isospin (spin) *blockade*.

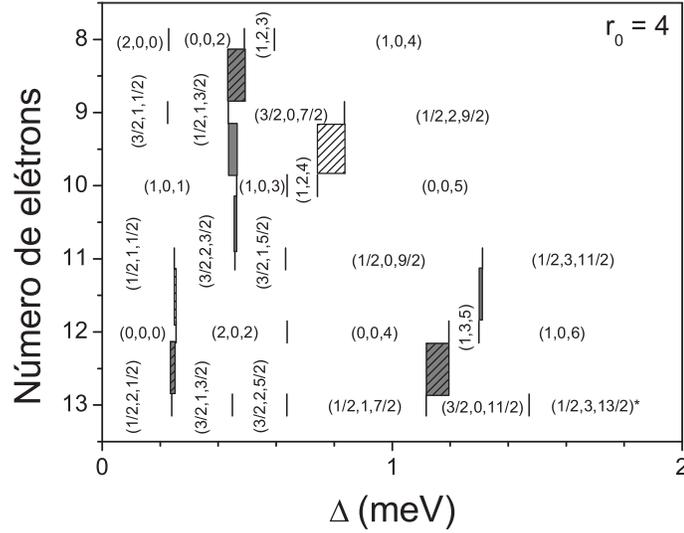


Figura 2.15: Diagrama de fases em função da distância entre os anéis, de $N = 8$ a 13 elétrons e para o valor do raio do anel $r_0 = 4.0 a_0$. As áreas hachuradas (cinza) marcam as regiões onde ocorrem o isospin (spin) *blockade*.

os CQRs se tornam fracamente acoplados para grandes distâncias entre os anéis. Tal situação é apresentada na Fig. 2.13(c) para $r_0 = 2.0 a_0$ e $d = 67.4 \text{ \AA}$ ($\Delta = 0.15 \text{ meV}$) onde os CQRs estão no regime de acoplamento fraco. Já que o sistema evolui para dois anéis separados quando $d \rightarrow \infty$ ($\Delta \rightarrow 0$), é possível encontrar camadas fechadas em $N = 4, 12, 20, \dots$, ou seja, exatamente o dobro de um anel simples. Podemos ver estas características no gráfico inserido na Fig. 2.13(c). Todavia, encontramos um considerável pico na energia de adição na Fig. 2.13(c) para $N=8$, indicando o acoplamento de dois anéis preenchidos até a metade, com spin total $S_z=2$. O pico em $N=12$, nesta figura, corresponde à duas camadas fechadas de 6 elétrons em cada anel.

O (iso)spin *blockade* ocorre quando a transição de um sistema com N -elétrons para outro com $(N+1)$ -elétrons corresponde à mudança total de (iso)spin ($|\Delta I_z| > 1/2$) $|\Delta S_z| > 1/2$. Experimentalmente N pode ser variado pelo potencial de *gate* permitindo o estudo das transições entre diferentes estados fundamentais [38]. Na Fig. 2.14(a) para $r_0 = 0$, nós recuperamos o caso CQDs [29]. Quando $r_0 = 4.0 a_0$

na Fig. 2.15, obtemos o diagrama de fase para moléculas artificiais formadas por CQRs. O diagrama de fase de ponto quânticos unidimensionais acoplados poderia ser similar, pois os níveis de uma partícula $\epsilon_{1,0}$ não estão envolvidos. Para $r_0 = 2.0 a_0$ temos um caso intermediário. Comparando com a Fig. 2.14(a) para CQDs, encontramos no casos de CQRs de $r_0 = 4.0 a_0$ (Fig. 2.15) que existem 4 (5) fases no caso $N = 9$ ($N = 11$) mostrando uma fase molecular a menos. Observamos que os efeitos de tunelamento e troca-correlação são maiores para os CQRs quando aumentamos o raio do anel. Por exemplo, no sistema de 12 elétrons, a fase atômica $(0, 0, 6)$ para QDs fortemente acoplados existe para $\Delta > 4.42$ meV ($d < 25.5 \text{ \AA}$) na Fig. 2.14(a). Entretanto, a correspondente fase atômica $(1, 3, 6)$ para CQRs fortemente acoplados na Fig. 2.15 aparece já para uma energia de tunelamento muito menor $\Delta = 1.29$ meV (grande separação entre os anéis $d = 53.6 \text{ \AA}$).

2.5 Conclusão

Utilizamos a teoria do funcional densidade dependente de spin para calcular o estado fundamental de dois anéis quânticos acoplados. Para distâncias intermediárias entre os anéis, observamos a formação de moléculas artificiais “anelares”. Fizemos a caracterização do estado fundamental deste sistema, variando a distância entre os anéis e seus respectivos raios. A energia de adição que pode ser medida experimentalmente também foi calculada. Mostramos que para $N \leq 8$ os CQRs apresentam qualitativamente configurações eletrônicas similares às dos CQDs. Entretanto, quando $N \geq 9$ novas fases eletrônicas são encontradas devido às diferenças entre os níveis de uma partícula do QD e do QR e à interação elétron-elétron neste sistema.

Capítulo 3

Transporte em pontos quânticos

3.1 Introdução

Nesta parte do trabalho estudamos as propriedades de transporte em pontos quânticos através da teoria quântica de espalhamento, resolvendo a equação de Lippmann-Schwinger (LS) numericamente. Embora esta teoria seja extensivamente aplicada em física atômica para estudar o espalhamento elétron-átomo [41] e elétron-molécula [42], ela ainda é muito pouco utilizada para estudar transporte eletrônico em nano-estruturas semicondutoras devido às complicações teóricas e às dificuldades numéricas. Existem outros tipos de abordagens teóricas que tratam o transporte em QDs na literatura, tais como: *Random-matrix Theory* [43], funções de Green fora do equilíbrio [44, 45], tunelamento ressonante [46–48] e a formulação de Landauer [6, 49].

Na formulação de Landauer a condutância é descrita em função das propriedades de espalhamento e por isso alguns trabalhos que resolvem a equação de LS são encontrados na literatura [50–54]. Entretanto, a vantagem do nosso trabalho é que podemos incluir a interação elétron-elétron entre os N -elétrons confinados dentro do QD com o elétron incidente, enquanto que nestes trabalhos existentes [50–54] só é possível considerar o espalhamento por um potencial fixo, que representa uma impureza ou um QD sem estruturas internas. A aplicação desta teoria aos pontos quânticos traz resultados teóricos interessantes e novas

informações para a compreensão dos mecanismos de transporte nestes sistemas.

Na seção 3.2 descrevemos como incluímos a interação de Coulomb entre o elétron incidente e os N -elétrons confinados no ponto quântico. Nos pontos quânticos a separação média entre os elétrons é muito maior que a espessura do QD, por isso os modelos teóricos usados para descrever estes QDs são bidimensionais. Desta maneira, o espalhamento em QDs tem que ser reformulado em duas dimensões, como está descrito na seção 3.3. Uma outra diferença entre estes dois sistemas está na condição de contorno. No caso do espalhamento por átomos considera-se que a função de onda do elétron incidente seja uma onda plana, pois no infinito podemos considerar que o elétron não sofre a ação de nenhum potencial externo. No caso de um QD, devemos analisar esta questão com mais cuidado, pois se um elétron incide dentro do ponto quântico lateral (Fig. 1.2) não podemos descrevê-lo por uma onda plana, pois ele já sofre ação dos contatos metálicos antes mesmo de passar pelo QD. E quando mudamos a condição de contorno temos que modificar a equação de Lippmann-Schwinger, conforme apresentado na seção 3.4. Podemos também estudar o espalhamento pelo ponto quântico auto-organizado (Fig. 1.3 (a)), ou seja, desconsiderando as barreiras. Neste caso, devemos utilizar a mesma condição de contorno usada para o espalhamento elétron-átomo e a equação de LS para este sistema é apresentada na seção 3.3. Como primeiro teste nós aplicamos este modelo teórico para um sistema particular, no qual só existe um elétron confinado dentro do QD (seção 3.5). E, finalmente, apresentamos os resultados e concluímos este capítulo nas seções 3.6 e 3.7.

3.2 Sistema elétron+QD

O espalhamento quântico é um processo no qual uma partícula colide contra um alvo. O alvo, por sua vez, é um centro espalhador que faz com que as partículas incidentes interajam com ele e desviem de suas “trajetórias” iniciais. Durante a colisão diferentes processos podem acontecer, como por exemplo: (i) o

espalhamento elástico, onde a partícula incidente e o alvo não mudam de energia, (ii) o espalhamento inelástico, onde a partícula incidente e o alvo sofrem uma mudança de seus estados quânticos e (iii) a reação, onde a partícula incidente e (ou) o alvo se quebram em duas ou mais partículas. Nesta tese consideramos somente o espalhamento elástico e inelástico. Em ambos os casos, nós temos que saber como é este alvo, ou seja, temos que investigar a estrutura eletrônica do ponto quântico com N -elétrons confinados. O hamiltoniano que descreve este sistema na aproximação da massa efetiva é igual a:

$$\left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_i^2 + V_{QD}(\mathbf{r}_i) \right) + \frac{e^2}{\epsilon_0^*} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right] \Phi^n = H_{QD} \Phi^n = \varepsilon_n \Phi^n \quad (3.1)$$

onde m^* é a massa efetiva e ϵ_0^* a constante dielétrica do material. O primeiro termo entre colchetes da Eq. (3.1) descreve a energia cinética dos elétrons, o segundo é o potencial que confina os elétrons no ponto quântico V_{QD} e o último termo descreve a interação de Coulomb entre os N -elétrons. O potencial do QD é dado por:

$$V_{QD}(r) = \begin{cases} \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 (r^2 - R_0^2) & r < R_0 \\ 0 & r > R_0 \end{cases} \quad (3.2)$$

Geralmente o ponto quântico é descrito pelo potencial parabólico $V_{QD}(r) = \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 r^2$, devido à sua analiticidade. Entretanto quando se considera o espalhamento pelo QD temos que usar um potencial que vá a zero no infinito, pois senão, não há como o elétron incidir contra o ponto quântico, como esquematizado na Fig. 3.1. Desta forma, utilizamos o potencial parabólico cortado (Eq. (3.2)) para descrever o ponto quântico no nosso modelo teórico.

A solução da Eq. (3.1) pode ser obtida, por exemplo, através do método de Hartree-Fock restrito ou não-restrito [55]. O caso restrito se aplica à sistemas de camadas fechadas e o não-restrito à sistemas de camadas abertas. A função de onda dos N -elétrons pode ser escrita como uma combinação linear de determinantes de Slater. E no caso de uma camada fechada, podemos escrever a função de onda total Φ^n por apenas um determinante de Slater. Este determinante de

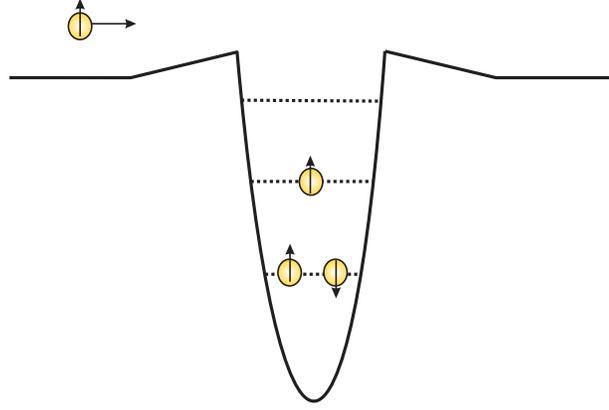


Figura 3.1: Esquema representativo do espalhamento de um elétron incidente e o alvo (ponto quântico com 3 elétrons confinados).

Slater pode ser expandido em termos dos spin-orbitais $\zeta_\alpha^n(\mathbf{r})$ da seguinte forma:

$$\Phi^n = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \zeta_\alpha^n(\mathbf{r}_1, \sigma_1) & \zeta_\beta^n(\mathbf{r}_1, \sigma_1) & \dots & \zeta_\pi^n(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \\ \zeta_\alpha^n(\mathbf{r}_2, \sigma_2) & \zeta_\beta^n(\mathbf{r}_2, \sigma_2) & \dots & \zeta_\pi^n(\mathbf{r}_2, \sigma_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \zeta_\alpha^n(\mathbf{r}_N, \sigma_N) & \zeta_\beta^n(\mathbf{r}_N, \sigma_N) & \dots & \zeta_\pi^n(\mathbf{r}_N, \sigma_N) \end{vmatrix} \quad (3.3)$$

onde $\alpha, \beta, \dots, \pi$ designam as diferentes funções de onda de uma partícula que descrevem o sistema. A equação de Schrödinger para o sistema total, ou seja, o elétron espalhado juntamente com os N -elétrons no ponto quântico é dada por:

$$(H - E_i)\Psi_i(\tau, \mathbf{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) = 0 \quad (3.4)$$

onde τ representa as coordenadas espaciais e de spin dos elétrons do QD e \mathbf{r}_{N+1} e σ_{N+1} denotam as coordenadas espaciais e de spin do elétron espalhado. O hamiltoniano do sistema elétron+QD é dado por:

$$H = H_0 + H_{QD} + V_{int}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}_{N+1}) \quad (3.5)$$

onde $H_0 = -\hbar^2 \nabla_{N+1}^2 / 2m^* + V_{QD}(\mathbf{r}_{N+1})$ e H_{QD} é o mesmo da Eq. (3.1). O potencial de interação entre o elétron incidente e os N -elétrons do QD é igual ao potencial de Coulomb, ou seja,

$$V_{int}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}_{N+1}) = \frac{e^2}{\epsilon_0^*} \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_{N+1} - \mathbf{r}_i|} \quad (3.6)$$

De uma forma geral, a função de onda que descreve o sistema elétron+QD em uma configuração particular do QD de energia ε_n , também deve ser escrita como uma combinação de determinantes de Slater, ou seja,

$$|\Psi_i\rangle = \sum_{n=1}^{N_c} |\mathcal{A}(\Phi^n \psi_{ni})\rangle \quad (3.7)$$

onde a soma é sobre todos os possíveis canais N_c . Um canal representa uma possível maneira do sistema se modificar após a colisão. Por exemplo, a excitação assistida pelo espalhamento eletrônico seria um possível canal. Neste caso, o elétron incidente perde energia após a colisão e promove uma excitação nos elétrons do alvo. As funções ψ_{ni} são os coeficientes da expansão que correspondem às funções de onda do contínuo que promovem a transição entre os canais ($i \rightarrow n$). O operador que dá a anti-simetrização entre as funções de onda do QD e do elétron incidente é igual a

$$\mathcal{A} = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \sum_{p=1}^{(N+1)!} (-1)^p \mathcal{P} \quad (3.8)$$

onde \mathcal{P} é o operador de permutação. A função de onda do elétron+QD é a solução do hamiltoniano total Eq. (3.4):

$$H|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle \quad (3.9)$$

onde $E_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} + \varepsilon_i = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} + \varepsilon_n$ é a energia total do sistema elétron+QD, que é a mesma para todos os diferentes canais $n = 1, \dots, N_c$. Substituindo a Eq. (3.7) na Eq. (3.9) obtemos:

$$\sum_{n=1}^{N_c} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_{N+1}}^2 + V_{QD}(\mathbf{r}_{N+1}) + H_{QD} + V_{int} \right) |\mathcal{A}(\Phi^n \psi_{ni})\rangle = E_i \sum_{n=1}^{N_c} |\mathcal{A}(\Phi^n \psi_{ni})\rangle \quad (3.10)$$

Na equação acima as incógnitas que queremos determinar são os coeficientes ψ_{ni} e para obter uma equação para estes coeficientes, devemos projetar esta equação nos estados do QD $|\Phi^m\rangle$, ou seja,

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{N_c} \langle \Phi^m | \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_{N+1}}^2 + V_{QD}(\mathbf{r}_{N+1}) + H_{QD} + V_{int} \right) |\mathcal{A}(\Phi^n \psi_{ni})\rangle &= \\ &= E_i \sum_{n=1}^{N_c} \langle \Phi^m | \mathcal{A}(\Phi^n \psi_{ni})\rangle \end{aligned} \quad (3.11)$$

Desta forma, podemos escrever a seguinte equação para o elétron espalhado:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_{N+1}}^2 + V_{QD}(\mathbf{r}_{N+1}) + \varepsilon_m - E_i \right) |\psi_{mi}\rangle &= \\ &= -\sum_{n=1}^{N_c} (V_{mn}^{st}(\mathbf{r}_{N+1}) + V_{mn}^{ex}(\mathbf{r}_{N+1})) |\psi_{ni}\rangle \end{aligned} \quad (3.12)$$

O potencial estático, V_{mn}^{st} na Eq. (3.12) é o potencial local e V_{mn}^{ex} é o potencial de troca devido às interações não-locais. Para o caso em que o QD possui uma estrutura de camadas fechadas, podemos derivar expressões para os potenciais estático e de troca como sendo iguais a:

$$\begin{aligned} V_{mn}^{st}(\mathbf{r}_{N+1}) &= \frac{2e^2}{\epsilon^*} \sum_{\alpha=1}^{N/2} \int \zeta_{\alpha}^{m*}(\mathbf{r}_1) \frac{e^{-\lambda|\mathbf{r}_{N+1}-\mathbf{r}_1|}}{|\mathbf{r}_{N+1}-\mathbf{r}_1|} \zeta_{\alpha}^n(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 + V_{QD}(\mathbf{r}_{N+1}) \delta_{m,n} , \\ V_{mn}^{ex}(\mathbf{r}_{N+1}) \psi_{ni}(\mathbf{r}_{N+1}) &= -\frac{e^2}{\epsilon^*} \sum_{\alpha=1}^{N/2} \zeta_{\alpha}^n(\mathbf{r}_{N+1}) \int \zeta_{\alpha}^{m*}(\mathbf{r}_1) \frac{1}{|\mathbf{r}_{N+1}-\mathbf{r}_1|} \psi_{ni}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 \end{aligned}$$

onde o fator 2 no potencial estático vem da degenerescência de spin. Nós usamos o potencial direto blindado, por duas razões: (i) para que quando $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ este vá a zero mais rápido que $1/|\vec{r}|$, que é a condição para a convergência do espalhamento e (ii) a blindagem representa o fundo de cargas do semiconductor.

Em uma maneira compacta a Eq. (3.12) pode ser reescrita como

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\nabla_{\mathbf{r}_{N+1}}^2 + k_m^2 \right) |\psi_{mi}\rangle = \sum_{n=1}^{N_c} V_{mn}(\mathbf{r}_{N+1}) |\psi_{ni}\rangle \quad (3.13)$$

onde $\frac{\hbar^2 k_m^2}{2m^*} = E_i - \varepsilon_m$. Em um caso mais geral, em que os N -elétrons confinados no QD formam uma camada aberta, temos que reescrever a função de onda Φ^n da Eq. (3.3) como uma combinação linear de determinantes de Slater e desta maneira o potencial de Coulomb direto e de troca na Eq. (3.13) serão modificados de acordo com a função de onda Φ^n .

3.3 Equação de Lippmann-Schwinger

A equação de Lippmann-Schwinger é uma versão integral da equação de Schrödinger, que incorpora as condições de contorno para o espalhamento. Para

podemos obter a equação de Lippmann-Schwinger para o ponto quântico, vamos primeiramente considerar o espalhamento elástico (um canal). A equação de Schrödinger (Eq. (3.13)) para um canal é dada por:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} (\nabla_{\mathbf{r}}^2 + k^2) |\psi\rangle = V(\mathbf{r})|\psi\rangle \quad (3.14)$$

onde $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{N+1}$, $|\psi\rangle = |\psi_{11}\rangle$, $V(\mathbf{r}_{N+1}) = V_{11}(\mathbf{r}_{N+1})$ e $k^2 = k_1^2$. A solução geral desta equação pode ser escrita na forma integral como sendo

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' G^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \quad (3.15)$$

onde $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é a solução da equação homogênea

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} (\nabla^2 + k^2) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.16)$$

e $G^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é a função de Green correspondente à equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} (\nabla^2 + k^2) G^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.17)$$

No problema de espalhamento através do QD, sem considerar o confinamento lateral, consideramos $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikx}$ com o vetor \mathbf{k} na direção x e a solução para a função de Green Eq. (3.17) é dada por [36]:

$$G_0^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{2m^*}{\hbar^2} (i/4) H_0^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (3.18)$$

$$G_0^{(-)}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{2m^*}{\hbar^2} (i/4) H_0^{(2)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad (3.19)$$

onde $H_0^{(1)}$ e $H_0^{(2)}$ são as usuais funções de Hankel de ordem zero [36]. Na verdade existem duas funções de Green, a que corresponde à solução física (causal) $G_0^{(+)}$ e a que representa a solução não-física (não-causal), mas matematicamente correta $G_0^{(-)}$. Como nós estamos interessados em calcular a seção de choque de espalhamento, somente a solução física será considerada e usaremos a notação $G^{(0)} = G_0^{(+)}$.

A expansão assintótica da função de Green para $r \rightarrow \infty$ é igual a

$$G^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{e^{i\pi/4}}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} e^{ikr} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \quad (3.20)$$

Tomando o limite de $r \rightarrow \infty$ na Eq. (3.15) e substituindo a expansão assintótica da função de Green (Eq. (3.20)), obtém-se a forma assintótica para a função de onda espalhada como sendo:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikx} + \frac{2m^*}{\hbar^2} \sqrt{\frac{i}{k}} \frac{e^{+ikr}}{\sqrt{r}} f_k(\theta) \quad (3.21)$$

onde

$$f_k(\theta) = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \langle \mathbf{k}' | T(E) | \mathbf{k} \rangle \quad (3.22)$$

e

$$\langle \mathbf{k}' | T(E) | \mathbf{k} \rangle = \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^2 r' \quad (3.23)$$

O ângulo entre os vetores de saída e entrada (\mathbf{k} e \mathbf{k}') é designado por θ .

A seção de choque diferencial pode ser encontrada através da seguinte equação [56]:

$$\lambda(\theta) = \frac{1}{k} |f_k(\theta)|^2 \quad (3.24)$$

Quando consideramos N_c possíveis canais, a equação de Lippmann-Schwinger correspondente à Eq. (3.13) se transforma em um sistema de equações integrais acopladas, as quais são iguais a:

$$\psi_{mi}(\mathbf{r}) = \varphi_m(\mathbf{r}) \delta_{m,i} + \sum_{n=1}^{N_c} \int d\mathbf{r}' G^{(0)}(\mathbf{k}_m, \mathbf{r}, \mathbf{r}') V_{mn}(\mathbf{r}') \psi_{ni}(\mathbf{r}') \quad (3.25)$$

onde $\varphi_m(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r}} = e^{ik_m x}$ e $G^{(0)}(\mathbf{k}_m, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é a mesma dada pela Eq. (3.18) trocando-se \mathbf{k} por \mathbf{k}_m . Numericamente nós resolvemos a equação (3.25) usando o método das frações contínuas multi-canal (Apêndice B). Para se determinar a seção de choque inelástica nós tomamos o limite de $r \rightarrow \infty$ na Eq. (3.25), o que nos dá as seguintes relações:

$$\psi_{mi}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ik_m x} \delta_{m,i} + \frac{2m^*}{\hbar^2} \sqrt{\frac{i}{k_m}} \frac{e^{+ik_m r}}{\sqrt{r}} f_{k_m, k_i}(\theta) \quad (3.26)$$

onde

$$f_{k_m, k_i}(\theta) = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \langle \mathbf{k}_m | T(E) | \mathbf{k}_i \rangle \quad (3.27)$$

e

$$\langle \mathbf{k}_m | T(E) | \mathbf{k}_i \rangle = \sum_{n=1}^{N_c} \int e^{-i\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r}'} V_{mn}(\mathbf{r}') \psi_{ni}(\mathbf{r}') d^2 r' \quad (3.28)$$

O ângulo entre os vetores de saída e entrada (\mathbf{k}_m e \mathbf{k}_i) é designado por θ .

A seção de choque diferencial inelástica também pode ser encontrada pela seguinte equação:

$$\lambda_{mi}(\theta) = \frac{k_m}{k_i^2} |f_{k_m, k_i}(\theta)|^2 \quad (3.29)$$

e para obtermos a seção de choque integral temos que integrar a seção de choque diferencial, ou seja,

$$\Gamma_{mi} = \int_0^{2\pi} \lambda_{mi}(\theta) d\theta \quad (3.30)$$

No caso 2D, as seções de choque diferencial e integral possuem dimensão de comprimento e por analogia com o caso 3D, ainda são chamadas de seções de choque.

3.3.1 Expansão em ondas parciais

Para podermos resolver numericamente a equação de Lippmann-Schwinger para o ponto quântico é interessante que possamos expandir as funções em ondas parciais. Expandir em ondas parciais quer dizer que utilizamos como base as autofunções do momento angular. No caso bidimensional [56, 57], a base ortonormal do momento angular é dada por:

$$\Theta_l(\phi) = \sqrt{\frac{\epsilon_l}{2\pi}} \cos(l\phi) \quad (3.31)$$

onde $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ e $\epsilon_l = 2$ para $l \neq 0$ e $\epsilon_l = 1$ para $l = 0$. Desta forma, expandimos todas as funções da equação de Lippmann-Schwinger para o espalhamento

elástico (Eq. (3.15)) em ondas parciais, ou seja,

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l,l'=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\epsilon_l}{2\pi}} i^l J_l(kr) \delta_{l,l'} \Theta_l(\phi_r) \Theta_{l'}(\phi_k) \quad (3.32)$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l,l'=0}^{\infty} \psi^{l,l'}(k, r) \Theta_l(\phi_r) \Theta_{l'}(\phi_k) \quad (3.33)$$

$$G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{-i\pi}{2} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\epsilon_l}{2\pi}} J_l(kr_{<}) H_l^{(1)}(kr_{>}) \Theta_l(\phi_r) \Theta_l(\phi_{r'})$$

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} V^l(r) \Theta_l(\phi_r) \quad (3.34)$$

onde $r_{<} = \min(r, r')$, $r_{>} = \max(r, r')$, $J_l(kr)$ ($Y_l(kr)$) é a função de Bessel (Neumann) e $H_l^{(1)}(kr) = J_l(kr) + iY_l(kr)$ é a função de Hankel [36]. Com a expansão em ondas parciais podemos escrever uma equação de Lippmann-Schwinger radial correspondente à Eq. (3.15), ou seja,

$$\psi^{l,l'}(k, r) = \sqrt{\frac{\epsilon_l}{2\pi}} i^l J_l(kr) \delta_{l,l'} + \sum_{l''=0}^{\infty} \int_0^{\infty} r' dr' g_0^l(r, r') V^{l,l''}(r') \psi^{l'',l'}(r') \quad (3.35)$$

onde

$$g_0^l(r, r') = \frac{-i\pi}{2} \sqrt{\frac{\epsilon_l}{2\pi}} J_l(kr_{<}) H_l^{(1)}(kr_{>}) \quad (3.36)$$

e

$$V^{l,l''}(r') = \int_0^{2\pi} d\phi_{r'} \Theta_l(\phi_{r'}) V(\mathbf{r}') \Theta_{l''}(\phi_{r'}) \quad (3.37)$$

Quando se usa o método das ondas parciais, basicamente o que acontece é a mudança da variável contínua ϕ para a onda parcial l e a função de onda $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, por sua vez, se transforma em uma matriz com os elementos $\psi^{l,l'}(k, r)$. No caso do espalhamento multi-canal (Eq. (3.25)) cada coeficiente do contínuo $\psi_{mi}(\mathbf{r})$ se transforma em uma matriz com elementos $\psi_{mi}^{l,l'}(k, r)$. Desta forma ganhamos tempo computacional, pois ao invés de calcularmos integrais bidimensionais numericamente, trabalhamos com matrizes pequenas. No caso do espalhamento pelo ponto quântico, o número de ondas parciais necessário para atingir uma precisão de 10^{-4} nos valores da seção de choque é $l=10$.

3.3.2 Phase shift

Além da vantagem computacional, o método das ondas parciais possibilita a análise em termos do *phase shift*, o qual revela informações à respeito do espalhamento por um potencial central. A Eq. (3.35) para um potencial central $V^{l,l''}(r) = V^{l,l}(r) = V(r)$ é igual a:

$$\psi^{l,l}(k, r) = \sqrt{\frac{\epsilon_l}{2\pi}} i^l J_l(kr) + \int_0^\infty r' dr' g_0^l(r, r') V(r') \psi^{l,l}(r') \quad (3.38)$$

Podemos escrever a expansão assintótica da equação acima da seguinte maneira:

$$\psi^{l,l}(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_l \sqrt{\frac{1}{kr}} \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4} - \Delta_l\right) \quad (3.39)$$

onde Δ_l é o *phase shift*. Para se determinar uma expressão para o *phase shift* temos que comparar a expansão assintótica da Eq. (3.38) com a da Eq. (3.39). Para tanto é necessário saber quais são as expansões assintóticas das funções de Bessel e Neumann [36], que são dadas por:

$$J_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.40)$$

$$Y_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.41)$$

Substituindo as expressões Eqs. (3.40, 3.41) na Eq. (3.38) no limite de $r \rightarrow \infty$, e igualando os coeficientes de e^{ikr} e e^{-ikr} da expansão assintótica da Eq. (3.38) com os da Eq. (3.39) obtemos as seguintes expressões:

$$A_l = 2 \sqrt{\frac{\epsilon_l}{\pi}} i^l e^{i\Delta_l} \quad (3.42)$$

$$e^{i\Delta_l} \sin \Delta_l = \frac{-\pi}{2i^l} \int_0^\infty r' dr' J^l(r') V(r') \psi^{l,l}(r') \quad (3.43)$$

Através destas expressões podemos relacionar o *phase shift* com a amplitude de espalhamento e com a seção de choque total por:

$$f_k(\theta) = 2 \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\epsilon_l}{\pi}} e^{i\Delta_l} \sin \Delta_l \Theta_l(\theta) \quad (3.44)$$

$$\Gamma_{11} = \frac{4}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \epsilon_l \sin^2 \Delta_l \quad (3.45)$$

A partir da equação (3.45) nota-se que a seção de choque total também é uma função do *phase shift*.

3.4 Equação de LS para o QD confinado

No caso do ponto quântico lateral (Fig. 1.2) é feita a deposição de contatos metálicos na amostra. Os elétrons não conseguem penetrar nestes contatos, que formam uma barreira de potencial. Sendo assim, temos que incluir esta barreira nos cálculos teóricos. Para tanto, nesta seção mostramos como as equações de espalhamento são modificadas para um sistema confinado, o qual está esquematizado na Fig. 3.2. A equação de Schrödinger que equivale à Eq. (3.14), para este caso é igual a

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_c(y) + V(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.46)$$

onde o potencial $V_c(y)$ nos dá a condição de contorno apropriada, ou seja, no nosso modelo o potencial confinante representa os contatos metálicos da Fig. 1.2. O potencial $V(\mathbf{r})$ é o mesmo potencial dado pela Eq. (3.14).

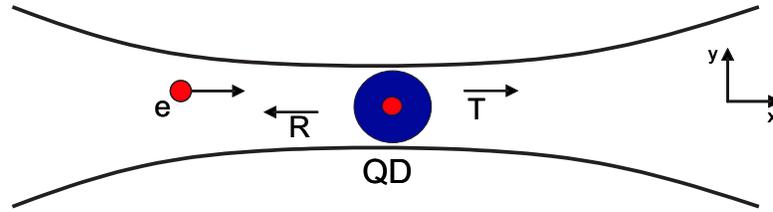


Figura 3.2: Esquema do espalhamento através de um ponto quântico confinado.

O elétron é livre para propagar na direção x , mas é confinado na direção y pelo potencial $V_c(y)$. A equação de Schrödinger para a direção y é dada por:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dy^2} + V_c(y) \right] \chi_n(y) = \varepsilon_n \chi_n(y) \quad (3.47)$$

Como já demonstrado por Bardarson *et al.* [51], os resultados da condutância são independentes da escolha do potencial confinante. Desta forma, escolhemos o potencial confinante como sendo parabólico $V_c(y) = \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 (y^2 - R_0^2)$, que será útil no cálculo do potencial de troca (Apêndice D) e possui a mesma forma que o potencial do QD. A solução da equação (3.47), para este potencial, é dada

por [58]:

$$\chi_n(y) = \frac{e^{-\frac{y^2}{2a_0^2}} H_n\left(\frac{y}{a_0}\right)}{(\pi a_0^2)^{1/4} \sqrt{2^n n!}} \quad (3.48)$$

onde H_n é o polinômio de Hermite [36], $\varepsilon_n = \hbar\omega_0(n + 1/2) - m^*\omega_0^2 R_0^2/2$ e $a_0 = \sqrt{\hbar/m^*\omega_0}$. As auto-funções $\chi_n(y)$ também são chamadas de modos transversais ou de sub-bandas.

Como as funções de onda $\chi_n(y)$ formam uma base completa podemos expandir a função de onda da Eq. (3.46) em termos destas funções, ou seja,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv \Psi_i(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \chi_n(y) \psi_{ni}(x) \quad (3.49)$$

onde o índice i se refere ao vetor de onda incidente. Introduzindo esta expansão na equação de Schrödinger, multiplicando-a por $\chi_m^*(y)$ e integrando-se na direção y obtemos as seguintes equações acopladas:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*} \right) \psi_{ni}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} V_{m,n}(x) \psi_{mi}(x) \quad (3.50)$$

onde $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*} + \varepsilon_n$ e

$$V_{m,n}(x) = \int dy \chi_m^*(y) V(\mathbf{r}) \chi_n(y) \quad (3.51)$$

Definindo a função de Green como sendo a solução da seguinte equação:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*} \right) G_n(x, x') = \delta(x - x') \quad (3.52)$$

podemos reescrever a solução da Eq. (3.50) como uma equação de Lippmann-Schwinger em uma dimensão, ou seja,

$$\psi_{ni}(x) = \varphi_n(x) + \frac{2m^*}{\hbar^2} \sum_{m=0}^{\infty} \int dx' G_n(x, x') V_{m,n}(x') \psi_{mi}(x') \quad (3.53)$$

onde $\varphi_n(x) = \exp(ik_n x) \delta_{n,i} / \sqrt{k_n}$. A função de Green para cada sub-banda é igual a:

$$G_n(x, x') = \frac{-i}{2k_n} e^{ik_n |x-x'|} \quad (3.54)$$

Como a energia do elétron incidente é dada por $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*} + \varepsilon_n$ existe a possibilidade de $\varepsilon_n > \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*}$ e de k_n ser um número puramente imaginário. Neste

caso temos que substituir k_n por $i|k_n|$ na Eq. (3.53) e as auto-funções $\psi_{ni}(x)$ são localizadas.

Tomando o limite de $x \rightarrow \infty$ na Eq. (3.53) obtemos:

$$\psi_{ni}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{e^{ik_n x}}{\sqrt{k_n}} \left[\delta_{ni} + \frac{m^*}{i\hbar^2} \sum_{m=0}^{\infty} \int dx' \frac{e^{-ik_n x'}}{\sqrt{k_n}} V_{m,n}(x') \psi_{mi}(x') \right] \quad (3.55)$$

Desta forma, a matriz T de espalhamento pode ser encontrada através da seguinte expressão:

$$T_{ni} = \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{e^{-ik_n x'}}{\sqrt{k_n}} V_{m,n}(x') \psi_{mi}(x') \quad (3.56)$$

Outra grandeza que podemos obter é a amplitude de probabilidade de transmissão t_{ni} , que por definição satisfaz a seguinte equação [52]:

$$\Psi_i(\mathbf{r}) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{\infty} t_{ni} \frac{e^{ik_n x}}{\sqrt{k_n}} \chi_n(y) \quad (3.57)$$

Multiplicando a Eq. (3.55) por $\chi_n(y)$, somando de $n = 0$ até ∞ e comparando a equação resultante com a Eq. (3.57) obtemos a seguinte expressão para t_{ni} :

$$t_{ni} = \delta_{ni} + \frac{m^*}{i\hbar^2} \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{e^{-ik_n x'}}{\sqrt{k_n}} V_{m,n}(x') \psi_m(x') \quad (3.58)$$

Assim podemos relacionar a matriz T de espalhamento com a amplitude de probabilidade de transmissão t_{ni} por:

$$t_{ni} = \delta_{ni} + \frac{m^*}{i\hbar^2} T_{ni} \quad (3.59)$$

Como veremos na próxima seção estas grandezas são úteis para determinarmos a condutância [59, 60].

3.4.1 Condutância

A formulação de Landauer [61–64], a qual relaciona a condutância com as propriedades de espalhamento do sistema, pode ser adaptada no tratamento da condutância de um sistema no qual são feitos dois contatos apropriados. Em 1957 Landauer introduziu a versão unidimensional, a qual consiste de uma barreira conectada através de dois fios unidimensionais em fontes externas (*i.e.*, dois

reservatórios de elétrons com diferentes potenciais químicos) as quais conduzem uma corrente I pelo sistema. A barreira é caracterizada pelo seu coeficiente de transmissão \mathcal{T} e reflexão $\mathcal{R} = 1 - \mathcal{T}$. Nesta formulação é importante considerar que os dois reservatórios sejam incoerentes, ou seja, não possuem relação de fase definida. Desta forma, Landauer [61,62] obteve a condutância através da barreira como sendo igual a:

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} \mathcal{T} \quad (3.60)$$

A condutância no caso onde existem vários canais de espalhamento foi generalizada por Büttiker [64] e é dada por:

$$G = G_0 \text{Tr}(tt^\dagger) \quad (3.61)$$

onde $G_0 = \frac{e^2}{\pi\hbar}$ e t é a matriz cujos elementos são dados pela Eq. (3.58). Desta maneira, vemos que determinando a matriz T de espalhamento, podemos obter a condutância para o ponto quântico confinado pela equação de Landauer-Büttiker (Eq. (3.61)).

3.5 Aplicações

Apresentamos nas seções anteriores um modelo teórico que descreve o espalhamento quântico através de um ponto quântico com N -elétrons confinados. Entretanto, nesta tese aplicamos este modelo para o caso onde somente um elétron está confinado no ponto quântico. Além desta aplicação ser a mais óbvia, esta revela informações básicas de um sistema mais complicado. Deste modo, nesta seção apresentamos os detalhes para este sistema particular considerando o espalhamento elástico na sub-seção 3.5.1, o espalhamento inelástico na sub-seção 3.5.2 e o espalhamento pelo QD confinado na sub-seção 3.5.3.

3.5.1 Espalhamento elástico

Nesta sub-seção descrevemos em detalhes como é o espalhamento elástico, onde o elétron confinado ocupa o estado fundamental de energia ε_1 . O hamiltono-

niano total para este sistema é dado por:

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{-\hbar^2 \nabla_1^2}{2m^*} + V_{QD}(\mathbf{r}_1) + H_{QD}(\mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.62)$$

onde H_{QD} é o hamiltoniano do QD e $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ designa o potencial de interação entre os dois elétrons (Coulomb).

A função de onda total deve ser escrita como combinação linear de determinantes de Slater, como mostrado na seção 3.2. As possíveis combinações para dois elétrons (elétron incidente + elétron confinado) são:

$$|\overline{\Phi^1}, \overline{\psi_{11}} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \Phi^1(\mathbf{r}_1)\beta(1) & \psi_{11}(\mathbf{r}_1)\beta(1) \\ \Phi^1(\mathbf{r}_2)\beta(2) & \psi_{11}(\mathbf{r}_2)\beta(2) \end{vmatrix}, \quad (3.63)$$

$$|\Phi^1, \psi_{11} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \Phi^1(\mathbf{r}_1)\alpha(1) & \psi_{11}(\mathbf{r}_1)\alpha(1) \\ \Phi^1(\mathbf{r}_2)\alpha(2) & \psi_{11}(\mathbf{r}_2)\alpha(2) \end{vmatrix}, \quad (3.64)$$

$$|\Phi^1, \overline{\psi_{11}} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \Phi^1(\mathbf{r}_1)\alpha(1) & \psi_{11}(\mathbf{r}_1)\beta(1) \\ \Phi^1(\mathbf{r}_2)\alpha(2) & \psi_{11}(\mathbf{r}_2)\beta(2) \end{vmatrix} e \quad (3.65)$$

$$|\psi_{11}, \overline{\Phi^1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{11}(\mathbf{r}_1)\alpha(1) & \Phi^1(\mathbf{r}_1)\beta(1) \\ \psi_{11}(\mathbf{r}_2)\alpha(1) & \Phi^1(\mathbf{r}_2)\beta(2) \end{vmatrix} \quad (3.66)$$

onde $\Phi^1(\mathbf{r})$ é a função de onda do elétron confinado no QD, $\alpha(i)$ e $\beta(i)$ correspondem às funções de spin para cima (\uparrow) e para baixo (\downarrow), respectivamente. O índice (i) denota o spin do elétron i .

Como o hamiltoniano total (Eq. (3.62)) comuta com os operadores spin total (\mathcal{S}^2) e sua componente na direção z (\mathcal{S}_z), as auto-funções do hamiltoniano devem ser auto-funções de \mathcal{S}_z e \mathcal{S}^2 . Os dois primeiros determinantes de Slater das Eqs.(3.63 e 3.64) são auto-funções de \mathcal{S}_z e \mathcal{S}^2 , mas os das Eqs.(3.65 e 3.66) não são auto-funções de \mathcal{S}^2 . Desta maneira, temos que fazer combinações lineares entre os determinantes de Slater das Eqs.(3.65 e 3.66), de tal forma que estas sejam auto-funções de \mathcal{S}_z e \mathcal{S}^2 . Estas combinações são dadas por:

$$\begin{aligned} |\Psi^s \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\Phi^1, \overline{\psi_{11}} \rangle + |\psi_{11}, \overline{\Phi^1} \rangle \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{11}(\mathbf{r}_1)\Phi^1(\mathbf{r}_2) + \psi_{11}(\mathbf{r}_2)\Phi^1(\mathbf{r}_1) \right] \left(\frac{|\downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow, \downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) \end{aligned} \quad (3.67)$$

e

$$\begin{aligned} |\Psi^t \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\Phi^1, \overline{\psi_{11}} \rangle - |\psi_{11}, \overline{\Phi^1} \rangle \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{11}(\mathbf{r}_1) \Phi^1(\mathbf{r}_2) - \psi_{11}(\mathbf{r}_2) \Phi^1(\mathbf{r}_1) \right] \left(\frac{|\downarrow, \uparrow\rangle + |\uparrow, \downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) \end{aligned} \quad (3.68)$$

Onde a Eq. (3.67) corresponde à função de onda do singlete e as Eq. (3.63, 3.64 e 3.68) correspondem às funções de onda do tripleto. Como o hamiltoniano (Eq. (3.62)) não possui nenhum potencial dependente de spin, o estado de spin total é conservado antes e depois da colisão. Desta maneira, a função de onda total deste sistema (elétron incidente + elétron confinado) pode ser escrita como:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi^1(\mathbf{r}_1) \psi_{11}(\mathbf{r}_2) \pm \Phi^1(\mathbf{r}_2) \psi_{11}(\mathbf{r}_1) \quad (3.69)$$

onde o sinal positivo (negativo) se refere ao estado de spin singlete (tripleto). Para podermos determinar o potencial para o elétron espalhado temos que calcular a seguinte equação:

$$\langle \Phi^1(\mathbf{r}_1) | H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle = E \langle \Phi^1(\mathbf{r}_1) | \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (3.70)$$

onde

$$E = \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*} \quad (3.71)$$

O lado esquerdo da Eq. (3.70) pode ser escrito como:

$$\langle \Phi^1 | H | \Psi \rangle = \langle \Phi^1 | H_{QD}^1 | \Psi \rangle + \langle \Phi^1 | H_{QD}^2 | \Psi \rangle + \langle \Phi^1 | V^{1,2} | \Psi \rangle \quad (3.72)$$

onde o índice super-escrito no operador denota de qual elétron este se refere. O primeiro termo da Eq. (3.72) é igual a:

$$\langle \Phi^1 | H_{QD}^1 | \Psi \rangle = \varepsilon_1 \left[\langle \Phi^1 | \Phi^1 \rangle \psi_{11} \pm \langle \Phi^1 | \psi_{11} \rangle \Phi^1 \right] \quad (3.73)$$

O segundo termo da Eq. (3.72), por sua vez, é dado por:

$$\langle \Phi^1 | H_{QD}^2 | \Psi \rangle = \langle \Phi^1 | \Phi^1 \rangle H_{QD}^2 \psi_{11} \pm \varepsilon_1 \langle \Phi^1 | \Phi^1 \rangle \psi_{11} \quad (3.74)$$

E o terceiro termo da Eq. (3.72) pode ser escrito como:

$$\langle \Phi^1 | V^{1,2} | \Psi \rangle = \langle \Phi^1 | V^{1,2} | \Phi^1 \rangle \psi_{11} \pm \langle \Phi^1 | V^{1,2} | \psi_{11} \rangle \Phi^1 \quad (3.75)$$

Substituindo-se as Eqs.(3.73, 3.74 e 3.75) na Eq. (3.72) obtemos :

$$\begin{aligned} & (H_{QD}^2 - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*})\psi_{11} + \langle \Phi^1 | V^{1,2} | \Phi^1 \rangle \psi_{11} \pm \\ & \pm \left(\langle \Phi^1 | V^{1,2} | \psi_{11} \rangle \Phi^1 + (\varepsilon_1 - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*}) \langle \Phi^1 | \psi_{11} \rangle \Phi^1 \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.76)$$

Podemos ainda simplificar a equação anterior da seguinte forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}(\nabla^2 + k_1^2)\psi_{11}(\mathbf{r}) + [V^{st}(\mathbf{r}) \pm V^{ex}(\mathbf{r})] \psi_{11}(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.77)$$

onde

$$V^{st}(\mathbf{r}) = \langle \Phi^1 | V^{1,2} | \Phi^1 \rangle + V_{QD}(\mathbf{r}) \quad (3.78)$$

$$\begin{aligned} & V_{11}^{ex}(\mathbf{r})\psi_{11}(\mathbf{r}) = \\ & = \Phi^1(\mathbf{r}) \left[\langle \Phi^1 | V^{1,2} | \psi_{11} \rangle + (\varepsilon_1 - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*}) \langle \Phi^1 | \psi_{11} \rangle \right] \end{aligned} \quad (3.79)$$

A equação de Lippmann-Schwinger correspondente à Eq. (3.77) é igual a:

$$\psi_{11}(\mathbf{r}) = \varphi_1(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' G^{(0)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}, \mathbf{r}') [V^{st}(\mathbf{r}') \pm V^{ex}(\mathbf{r}')] \psi_{11}(\mathbf{r}') \quad (3.80)$$

e numericamente pode ser resolvida através do método das frações contínuas, que está apresentado no Apêndice B.

Através da Eq. (3.80) podemos ver que o potencial de troca é diferente quando os dois elétrons formam um estado de spin singleto (sinal positivo) ou tripleto (sinal negativo). Então quando se calcula o espalhamento dependente de spin temos que calcular separadamente o espalhamento para o estado singleto e para o tripleto e suas seções de choque são dadas respectivamente por:

$$\sigma_{11}^s(\theta) = \frac{1}{k_1} |f_{11}^s(\theta)|^2 \quad (3.81)$$

$$\sigma_{11}^t(\theta) = \frac{1}{k_1} |f_{11}^t(\theta)|^2 \quad (3.82)$$

onde

$$f_{11}^s(\theta) = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int d^2\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}'_1 \cdot \mathbf{r}'} [V^{st}(\mathbf{r}') + V^{ex}(\mathbf{r}')] \psi_{11}(\mathbf{r}') \quad (3.83)$$

$$f_{11}^t(\theta) = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int d^2\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}'_1 \cdot \mathbf{r}'} [V^{st}(\mathbf{r}') - V^{ex}(\mathbf{r}')] \psi_{11}(\mathbf{r}') \quad (3.84)$$

Uma grandeza que também podemos calcular é a seção de choque não-polarizada (np), a qual é dada pela média estatística das possíveis configurações, ou seja,

$$\sigma_{11}^{np}(\theta) = \frac{1}{4k_1}(|f_{11}^s(\theta)|^2 + 3|f_{11}^t(\theta)|^2) \quad (3.85)$$

onde o fator 3 que multiplica o módulo ao quadrado da amplitude de espalhamento do tripleto é devido a existência de três diferentes estados do tripleto, que são espalhados com a mesma probabilidade. Uma outra grandeza interessante que podemos obter é a seção de choque de *spin-flip* (sf) [65, 66], a qual mede a probabilidade do elétron incidente ser espalhado e mudar de spin.

$$\sigma_{11}^{sf}(\theta) = \frac{1}{4k_1}|f_{11}^t(\theta) - f_{11}^s(\theta)|^2 \quad (3.86)$$

Nesta expressão o fator 3 não aparece, pois somente um dos estados do tripleto pode mudar o spin $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$.

3.5.2 Espalhamento multi-canal

Um outro processo que podemos estudar utilizando o espalhamento por elétrons é o chamado espalhamento multi-canal, o qual revela qual é a probabilidade de um elétron incidente promover uma excitação ou decaimento dos elétrons dentro do ponto quântico. A priori o número de canais de excitação e decaimento são infinitos, mas obviamente quando fazemos cálculos numéricos temos que truncar este número. No caso do potencial parabólico cortado, o primeiro nível de energia excitado possui degenerescência igual a 2, um com momentum angular $l = 1$ e outro com $l = -1$. Para considerarmos como possíveis canais de espalhamento o estado fundamental ϵ_1 e o primeiro estado excitado ϵ_2 , temos que considerar três canais acoplados por causa da degenerescência do primeiro nível de energia. Como inicialmente o elétron confinado possui a maior probabilidade de se encontrar no estado fundamental e como a excitação para o primeiro estado excitado também é a mais provável, vamos considerar nesta tese apenas três canais acoplados. Os detalhes do espalhamento por três canais estão apresentados no Apêndice C.

3.5.3 Espalhamento pelo QD confinado

Como vimos na seção 3.4 a equação de Lippmann-Schwinger para o QD confinado acopla várias sub-bandas. Entretanto, nesta tese usamos somente a sub-banda de energia mais baixa. Deste modo, a equação de LS para uma única sub-banda é dada por:

$$\psi_1(x) = \frac{e^{ik_1x}}{\sqrt{k_1}} + \frac{2m^*}{\hbar^2} \int dx' G_1(x, x') V_{1,1}(x') \psi_1(x') \quad (3.87)$$

onde $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*} + \varepsilon_1$. O potencial e a função de Green para uma única sub-banda são iguais a:

$$V_{1,1}(x) = \int dy \chi_1^*(y) V(\mathbf{r}) \chi_1(y) \quad (3.88)$$

e

$$G_1(x, x') = \frac{-i}{2k_1} e^{ik_1|x-x'|} \quad (3.89)$$

Também consideramos somente um elétron confinado no QD e assumimos que sua função de onda seja igual a do estado fundamental do oscilador harmônico [58]:

$$\Phi_1(r) = \frac{e^{-\frac{r^2}{2a_0^2}}}{a_0 \sqrt{\pi}} \quad (3.90)$$

O cálculo do potencial de troca no caso do QD confinado é mais complicado que o sem confinamento e quando utilizamos a função de onda do oscilador harmônico, obtemos expressões semi-analíticas para o potencial de troca como pode ser visto no Apêndice D. Um outro fato que justifica esta aproximação é que a função de onda do estado fundamental do oscilador harmônico não difere muito da do QD confinado.

Da mesma forma que no espalhamento elástico sem o confinamento o potencial de troca é diferente quando os dois elétrons formam um estado de spin singleto (sinal positivo) ou tripleto (sinal negativo). Assim temos que calcular separadamente o espalhamento para o estado singleto e para o tripleto, onde as respectivas matrizes T são dadas por:

$$T_{11}^s = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{e^{-ik_1x'}}{\sqrt{k_1}} [V_{1,1}^{st}(x') + V_{1,1}^{ex}(x')] \psi_{11}(x') \quad (3.91)$$

e

$$T_{11}^t = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{e^{-ik_1 x'}}{\sqrt{k_1}} [V_{1,1}^{st}(x') - V_{1,1}^{ex}(x')] \psi_{11}(x') \quad (3.92)$$

onde

$$V_{1,1}^{st}(x) = \int dy \chi_1^*(y) V^{st}(\mathbf{r}) \chi_1(y) \quad (3.93)$$

$$(3.94)$$

e

$$V_{1,1}^{ex}(x) \psi_{11}(x) = \int dy \chi_1^*(y) V^{ex}(\mathbf{r}) \chi_1(y) \psi_{11}(x) \quad (3.95)$$

Desta maneira, podemos definir a condutância onde os dois elétrons formam um estado tripleto e singleto, respectivamente, como sendo iguais a:

$$G_{11}^s = G_0 |1 + T^s|^2 \quad (3.96)$$

e

$$G_{11}^t = G_0 |1 + T^t|^2 \quad (3.97)$$

Além disso, podemos definir uma condutância não-polarizada e uma condutância de *spin-flip* em analogia ao espalhamento elástico sem confinamento [Eqs. (3.85 e (3.86))] da seguinte maneira:

$$G_{11}^{np} = \frac{G_0}{4} (|1 + T_{11}^s|^2 + 3|1 + T_{11}^t|^2) \quad (3.98)$$

e

$$G_{11}^{sf} = G_0 \frac{1}{4} |T_{11}^t - T_{11}^s|^2 \quad (3.99)$$

onde G_{11}^{np} é a condutância não-polarizada e G_{11}^{sf} é a condutância de *spin-flip*.

3.6 Resultados

Nesta seção apresentamos os resultados do espalhamento elástico e inelástico através de um ponto quântico contendo apenas um elétron confinado. O primeiro

passo que temos que tomar para se incluir a interação elétron-elétron é calcular as auto-funções e auto-energias do hamiltoniano Eq. (3.1) para $N=1$, o qual possui a seguinte expressão:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{QD}(r) \right] \Phi^n = H_{QD} \Phi^n = \varepsilon_n \Phi^n \quad (3.100)$$

Nós resolvemos a Eq. (3.100) expandindo a função de onda na base de Fock-Darwin (Eq. 2.2), da mesma forma que foi feito na seção 2.2. As auto-energias e as auto-funções são determinadas diagonalizando a matriz cujos elementos são dados pela Eq. (2.7), substituindo-se o potencial V_{QR} por V_{QD} da Eq. (3.2). A Fig. 3.3 compara os níveis de energia do potencial parabólico infinito e do cortado (Eq. (3.2)). A partir das Figs. (3.3 e 3.4) podemos perceber que o estado fundamental $(0,0)$ e o primeiro estado excitado $(0,\pm 1)$ do potencial parabólico cortado (PPC) não são muito diferentes do potencial parabólico infinito para $R_0 = 2.37 a_0$. Entretanto o estado $(1,0)$ é bem distinto em ambos potenciais.

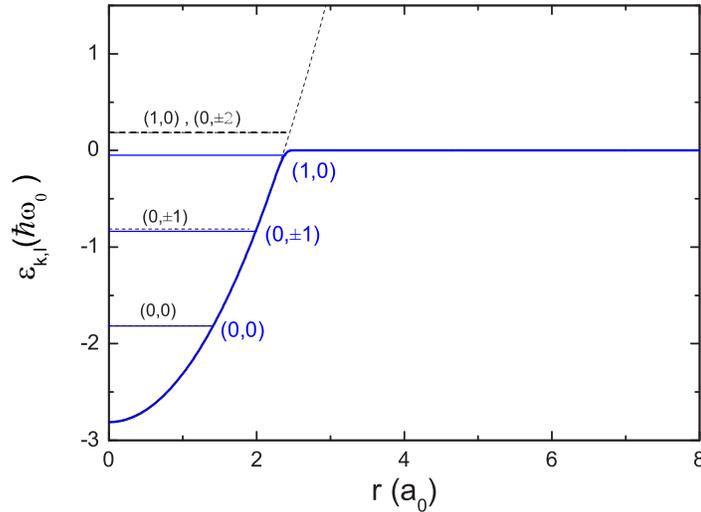


Figura 3.3: Níveis de energia do potencial parabólico infinito (preto) e cortado (azul), para $R_0 = 2.37 a_0$, ($a_0 = \sqrt{\hbar/m^*\omega_0}$). Os índices (k,l) denotam o número quântico radial e o momento angular, respectivamente.

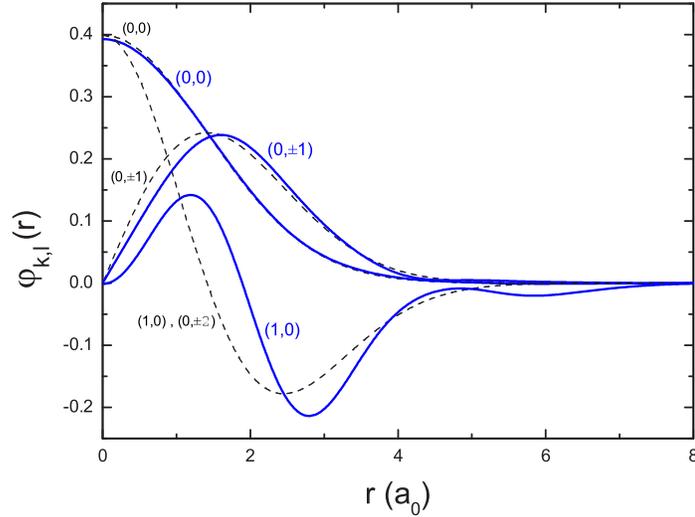


Figura 3.4: Funções de onda do potencial parabólico infinito (preto) e cortado (azul), para $R_0 = 2.37 a_0$. Os índices (k, l) denotam o número quântico radial e o momento angular, respectivamente.

Também vemos que o potencial parabólico cortado com $R_0 = 2.37 a_0$ comporta somente 3 níveis discretos. Conclui-se então que quando aumentamos o valor de R_0 , mais níveis discretos aparecem dentro do PPC e o último nível ligado será bem distinto do seu respectivo do potencial parabólico infinito.

3.6.1 Convergência do MCF

O método MCF foi testado para diversos problemas como por exemplo: espalhamento elétron-átomo [67] e elétron-molécula [68]. Em todos estes casos, este método mostrou uma rápida convergência. Na tabela 3.1 damos um exemplo da convergência deste método para o espalhamento pelo ponto quântico com os parâmetros $R_0 = 2.37 a_0$ (35 nm) e $\hbar\omega_0 = 5$ meV, desconsiderando o potencial de troca e com a energia do elétron incidente $E_0 = 0.6$ meV. Vemos que os resultados para a tangente do *phase shift* para diferentes valores do momento angular $l = 0, 1, 2, 3$ e 4 convergem rapidamente.

ITERAÇÃO	0	1	2	3	4	5	6
$\tan \Delta_0$	-7.2103	-6.0844	-1.7589	-1.6348	-1.6442	-1.6347	-1.6347
$\tan \Delta_1$	-0.8833	-0.6862	-0.6874	-0.6305	-0.6305	-0.6305	-0.6305
$\tan \Delta_2$	-0.0288	0.1838	0.2465	0.2495	0.2495	0.2495	0.2495
$\tan \Delta_3$	5.43(-4)	-2.62(-4)	-3.66(-5)	-3.64(-5)	-3.64(-5)	-3.64(-5)	-3.64(-5)
$\tan \Delta_4$	1.23(-4)	-1.20(-4)	-1.20(-4)	-1.20(-4)	-1.20(-4)	-1.20(-4)	-1.20(-4)

Tabela 3.1: A tangente do *phase shift* para diferentes valores do momento angular $l = 0, 1, 2, 3$ e 4 é mostrada em função das seis primeiras iterações do MCF, considerando o espalhamento elástico sem a inclusão do potencial de troca com a energia do elétron incidente igual a $E_0=0.6$ meV. O número dentro dos parênteses representa a potência da casa decimal, por exemplo, $(-4) = 10^{-4}$.

Apesar desta tabela apresentar os resultados para uma situação específica, verifica-se em todos os nossos cálculos, sejam eles do espalhamento elástico ou inelástico, dependentes ou não de spin, o mesmo tipo de convergência. Também é interessante notar na tabela 3.1 que os valores para aproximação de Born (iteração 0) são muito diferentes dos obtidos após a convergência. Este fato evidencia a necessidade de se usar um método mais robusto para se calcular as grandezas relacionadas ao espalhamento, como é o caso do MCF.

3.6.2 Espalhamento elástico

As seções de choque diferencial (SCD) elásticas, considerando diferentes energias do elétron incidente $E_0=0.6$ meV, $E_0=1.7$ meV e $E_0=4.2$ meV ($E_0 = \hbar^2 k_1^2 / 2m^*$) são mostradas nas Figs.(3.5, 3.6 e 3.7). Para podermos entender a diferença entre a dependência ou não com o spin dos dois elétrons, comparamos os resultados do espalhamento pelo potencial estático (curva azul) com o espalhamento não-polarizado (curva preta) na Fig. 3.5. Verificamos através das SCD apresentadas na figura 3.5 que a dependência com spin é mais importante para valores pequenos da energia do elétron incidente ($E_0=0.6$ meV) e para pequenos valores do ângulo de espalhamento. Este fato também pode ser observado na Fig. 3.6,

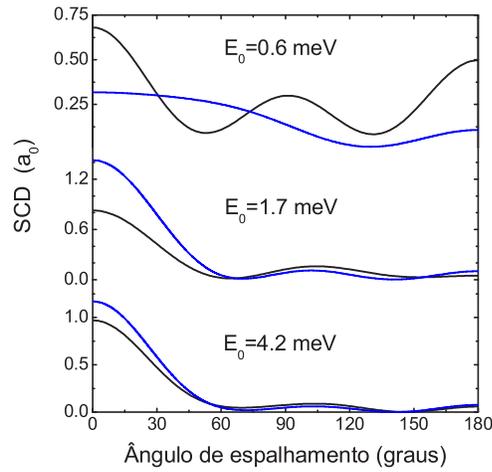


Figura 3.5: Seção de choque diferencial (SCD) elástica em função do ângulo de espalhamento, considerando diferentes energias do elétron incidente $E_0=0.6$ meV, $E_0=1.7$ meV e $E_0=4.2$ meV. A curva azul indica o espalhamento pelo potencial estático e a curva preta representa o espalhamento não-polarizado. Parâmetros do QD $R_0=35$ nm e $\hbar\omega_0=5$ meV.

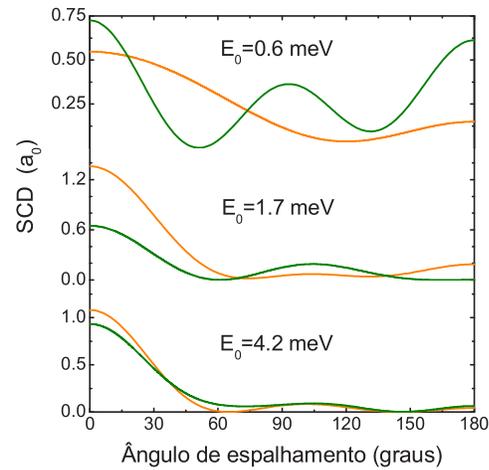


Figura 3.6: Seção de choque diferencial (SCD) elástica em função do ângulo de espalhamento, considerando diferentes energias do elétron incidente $E_0=0.6$ meV, $E_0=1.7$ meV e $E_0=4.2$ meV. A curva verde (laranja) indica o espalhamento pelo QD quando os dois elétrons formam um estado tripleto (singleto). Parâmetros do QD $R_0=35$ nm e $\hbar\omega_0=5$ meV.

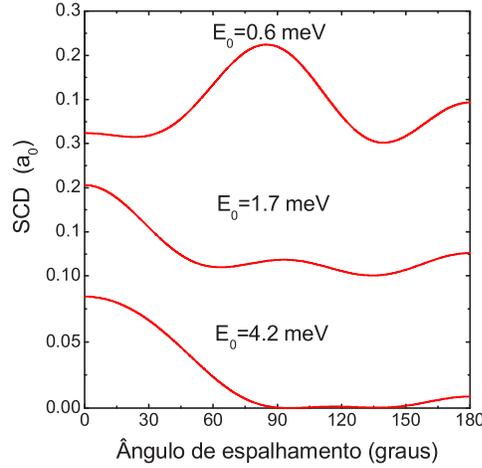


Figura 3.7: Seção de choque diferencial (SCD) elástica de *spin flip* em função do ângulo de espalhamento, com diferentes energias do elétron incidente $E_0=0.6$ meV, $E_0=1.7$ meV e $E_0=4.2$ meV. Parâmetros do QD $R_0 = 35$ nm e $\hbar\omega_0 = 5$ meV.

a qual compara a seção de choque diferencial do singlete (curva laranja) com a do tripleto (curva verde), ou seja, para $E_0=1.7$ meV e $E_0=4.2$ meV as SCD do singlete e do tripleto são similares. Notamos também que a seção de choque diferencial de *spin-flip*, apresentada na Fig. 3.7, é máxima para ângulos próximos de 90° para $E_0=0.6$ meV, enquanto que para $E_0=1.7$ meV e $E_0=4.2$ meV esta é máxima para ângulos próximos de zero. A Fig. 3.8 mostra a seção de choque integral (SCI) elástica para o espalhamento pelo potencial estático (curva azul) e não-polarizado (curva preta). Mais uma vez, através da seção de choque total apresentada na Fig. 3.8, vemos que a importância da dependência com o spin surge para baixas energias, ou seja, a SCI quando não se inclui o potencial de troca (curva azul) é bem distinta da SCI quando considera-se a troca entre os elétrons (curva preta) quando a energia do elétron incidente é pequena.

A seção de choque integral do singlete (curva laranja) e tripleto (curva verde) são apresentadas na Fig. 3.9. Nota-se que na SCI tanto do singlete e do tripleto, como também na do espalhamento pelo potencial estático (Fig. 3.8) aparece uma ressonância. Estas ressonâncias podem ser explicadas através da análise dos *phase*

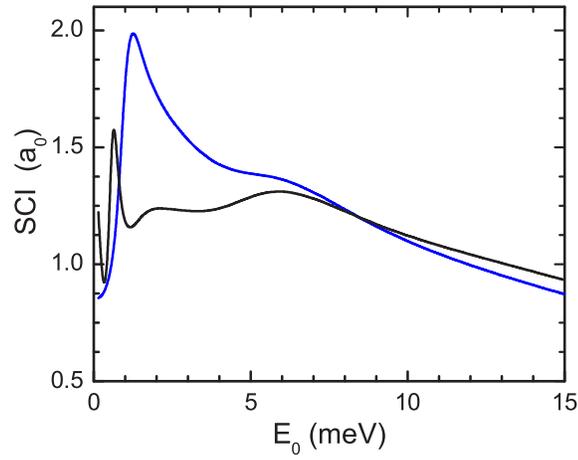


Figura 3.8: Seção de choque integral (SCI) elástica em função da energia do elétron incidente E_0 , onde a curva azul indica o espalhamento pelo potencial estático e a curva preta representa o espalhamento não-polarizado. Parâmetros do QD $R_0 = 35$ nm e $\hbar\omega_0 = 5$ meV.

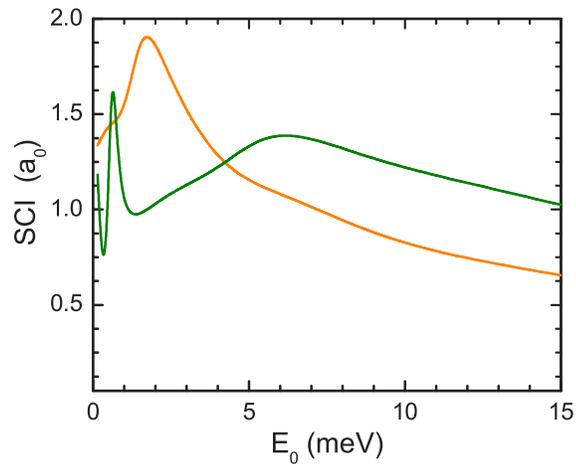


Figura 3.9: Seção de choque integral (SCI) elástica em função da energia do elétron incidente E_0 , onde a curva verde (laranja) indica o espalhamento pelo QD quando os dois elétrons formam um estado tripleto (singleto). Parâmetros do QD $R_0 = 35$ nm e $\hbar\omega_0 = 5$ meV.

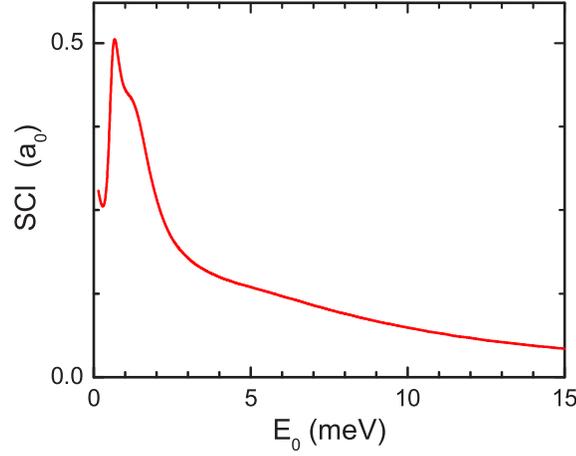


Figura 3.10: Seção de choque integral (SCI) elástica de *spin flip* em função da energia do elétron incidente E_0 . Parâmetros do QD $R_0 = 35$ nm e $\hbar\omega_0 = 5$ meV.

shifts que estão mostrados nas Figs. (3.12, 3.13 e 3.14). Geralmente os *phase shifts* são funções que variam suavemente em função da energia do elétron incidente. Entretanto, sobre certas circunstâncias pode acontecer um variação brusca dos *phase shifts* em certo intervalo de energia e portanto haverá uma mudança dramática na seção de choque para estas energias como pode ser verificado pela Eq. (3.45). Uma explicação física deste fato pode ser dada ao considerarmos a equação de Schrödinger para um potencial central, na base do momento angular (equivalente à Eq. (3.38)).

$$\left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) + \frac{l^2}{r^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2} V(r) \right] \psi^{l,l}(k, r) + k^2 \psi^{l,l}(k, r) = 0 \quad (3.101)$$

Identificamos na Eq. (3.101) um potencial efetivo $V_{ef} = \frac{l^2}{r^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2} V(r)$, para cada diferente momento angular l . A Fig. 3.11 apresenta este potencial efetivo em função de r para $V(r) = V_{QD}(r)$. Supondo que exista um estado meta-estável com energia E_r , como esquematizado na Fig. 3.11, então quando a energia do elétron incidente E_0 for igual a E_r ocorrerá uma variação rápida no *phase shift* e portanto aparecerá uma ressonância na SCI [69]. Como esta ressonância depende

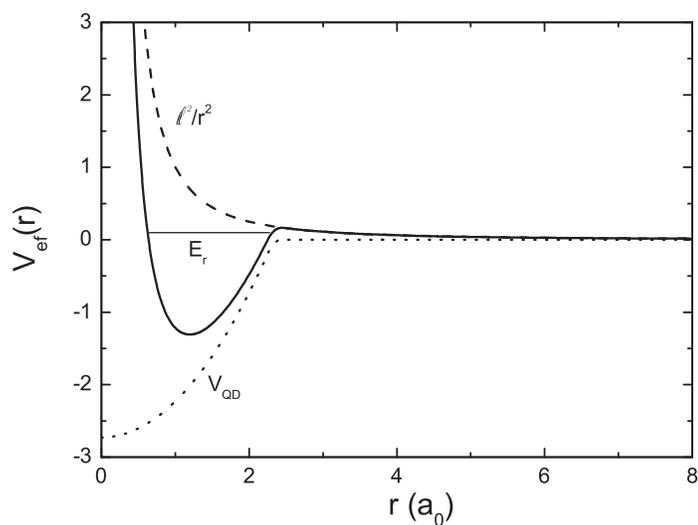


Figura 3.11: O potencial efetivo em função de r é representado pela curva sólida, o potencial do QD pela curva pontilhada e a barreira centrífuga pela curva pontilhada.

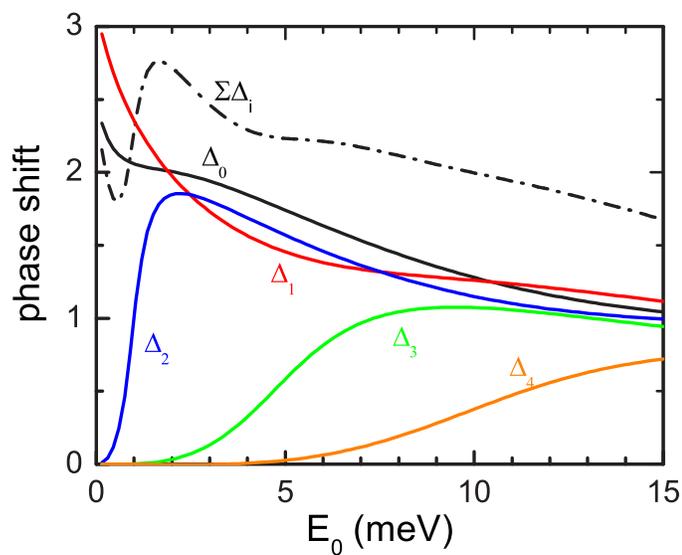


Figura 3.12: *Phase shift* em função da energia do elétron incidente E_0 , para o potencial estático.

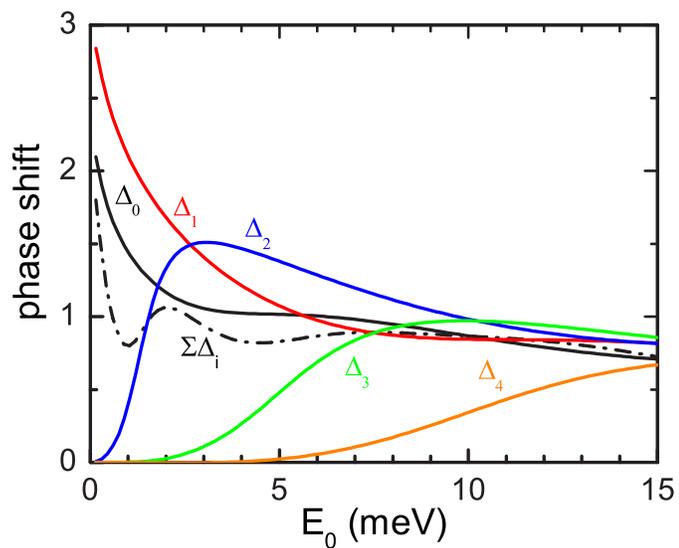


Figura 3.13: *Phase shift* em função da energia do elétron incidente E_0 , para o potencial do singlete.

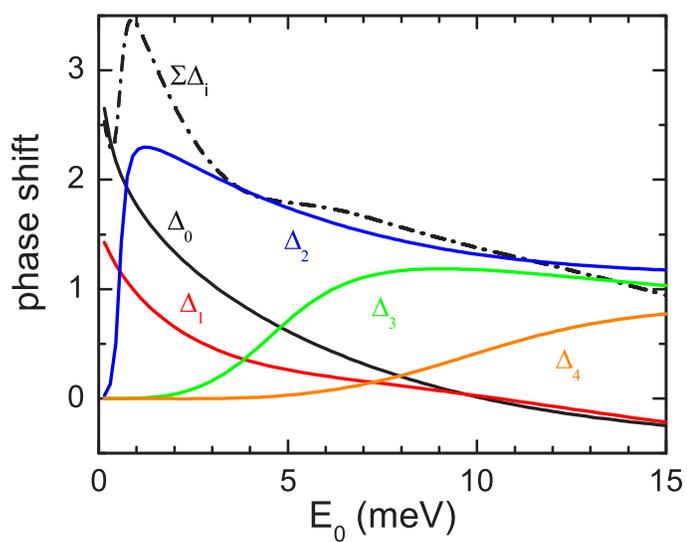


Figura 3.14: *Phase shift* em função da energia do elétron incidente E_0 , para o potencial do tripleto.

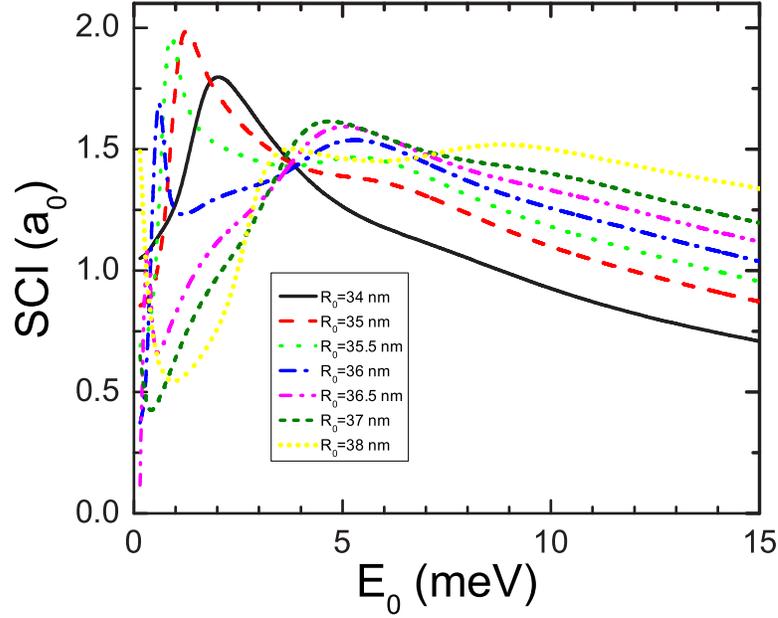


Figura 3.15: Seção de choque integral (SCI) elástica em função da energia do elétron incidente E_0 , para o espalhamento pelo potencial estático para vários diferentes tamanhos do QD com $\hbar\omega_0 = 5$ meV. A figura inserida mostra que cor corresponde a que valor de R_0 .

da forma do potencial $V(r)$ ela é usualmente chamada de ressonância de forma.

Então a ressonância que aparece na SCI do espalhamento pelo potencial estático (Fig. 3.8) com energia $E_0 = 1.22$ meV corresponde à variação rápida do *phase shift* Δ_2 mostrado na Fig. 3.12. Neste caso $\Delta_2 \approx \pi/2$ para o valor da energia $E_0 = 1.22$ meV. Também notamos a existência de outra ressonância mais larga com seu máximo em $E_0 = 6.14$ meV que corresponde à variação rápida de Δ_3 como também pode ser verificado na Fig. 3.12. As ressonâncias da SCI do singleto ($E_0 = 1.72$ meV) e do tripleto ($E_0 = 0.57$ meV) mostradas na Fig. 3.9, também são proeminentes da variação rápida de Δ_2 , como pode ser verificado pelas Figs. (3.13 e 3.14).

Na Fig. 3.10 apresentamos a seção de choque integral elástica de *spin-flip*. A seção de choque de *spin-flip* depende das amplitudes de espalhamento do singleto e do tripleto como mostrado pela Eq. (3.86). Como a SCI (módulo ao quadrado

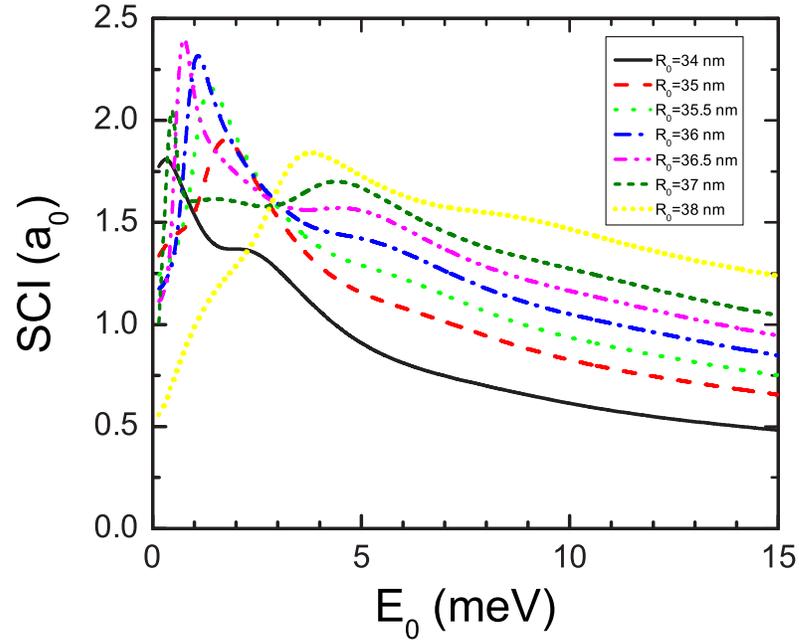


Figura 3.16: Seção de choque integral (SCI) elástica em função da energia do elétron incidente E_0 , para o espalhamento pelo potencial do singlete para vários diferentes tamanhos do QD com $\hbar\omega_0 = 5$ meV. A figura inserida mostra que cor corresponde a que valor de R_0 .

das amplitudes de espalhamento) do singlete e tripleto são distintas para baixas energias, a seção de choque de *spin-flip* por sua vez será máxima nesta mesma região de energia, como pode ser observado na figura 3.10.

As figuras (3.15, 3.16 e 3.17) mostram a SCI elástica, variando-se o tamanho do QD, para o espalhamento pelo potencial estático, do singlete e do tripleto, respectivamente. Quando aumenta-se R_0 o potencial do QD fica mais negativo e por sua vez a energia de ressonância E_r (Fig. 3.11) diminui. Deste modo vemos que o pico da ressonância nas Figs.(3.15, 3.16 e 3.17) move-se para valores de energia menor com o aumento de R_0 . Também nota-se que o pico de ressonância às vezes desaparece, por exemplo, na Fig. 3.16 o pico que existia no intervalo $0.1 \text{ meV} \leq E_0 \leq 2.5 \text{ meV}$ some quando $R_0 = 38$ nm. Este fato pode ser explicado pelo seguinte argumento: quando aumentamos R_0 o potencial fica mais negativo

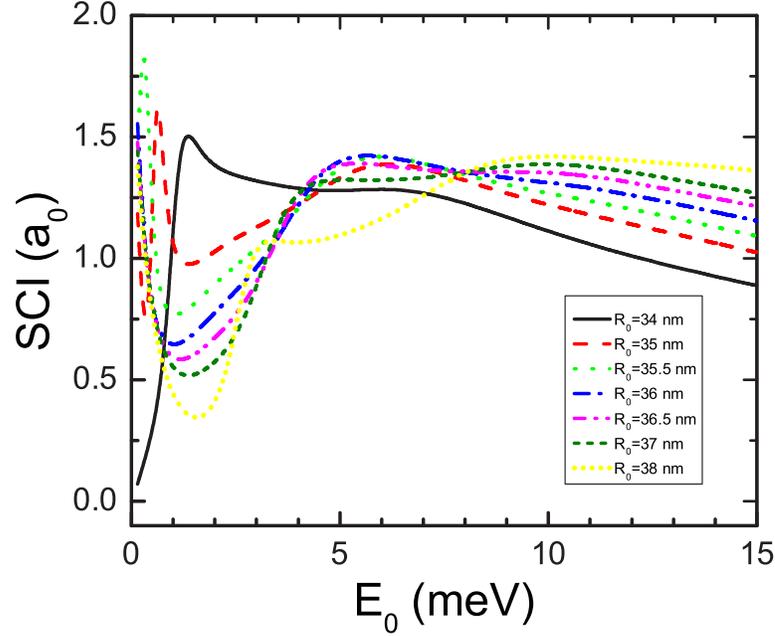


Figura 3.17: Seção de choque integral (SCI) elástica em função da energia do elétron incidente E_0 , para o espalhamento pelo potencial do tripleto para vários diferentes tamanhos do QD com $\hbar\omega_0 = 5$ meV. A figura inserida mostra que cor corresponde a que valor de R_0 .

e mais níveis de energia discretos surgem; e aquele estado de energia E_r , que antes era um estado meta-estável, se torna um destes estados discretos ocasionado o desaparecimento da ressonância.

O potencial do QD no nosso modelo é determinado pelos parâmetros R_0 e ω_0 e o potencial de Coulomb direto pelo parâmetro λ que dita o alcance do potencial blindado. Desta forma, temos um potencial diferente para cada escolha destes parâmetros e o espalhamento será diferente para cada um destes potenciais. Nas Figs. (3.18 e 3.19) apresentamos as SCI para diferentes escolhas dos parâmetros do QD ($\hbar\omega_0$ e R_0) e de λ . Na Fig. 3.18, comparamos a SCI para o QD com os parâmetros $\hbar\omega_0 = 5$ meV e $R_0 = 35$ nm (curva preta tracejada) com $\hbar\omega_0 = 3$ meV para $R_0 = 45$ nm (vermelha), $R_0 = 46$ nm (verde) e $R_0 = 47$ nm (azul) e em todos estes casos assumimos $\lambda = 1/a_0$. O potencial do QD é dado pela relação $V_{QD} = m^*\omega_0^2(r^2 - R_0^2)/2$ para $r < R_0$ e zero para $r > R_0$ e deste modo podemos

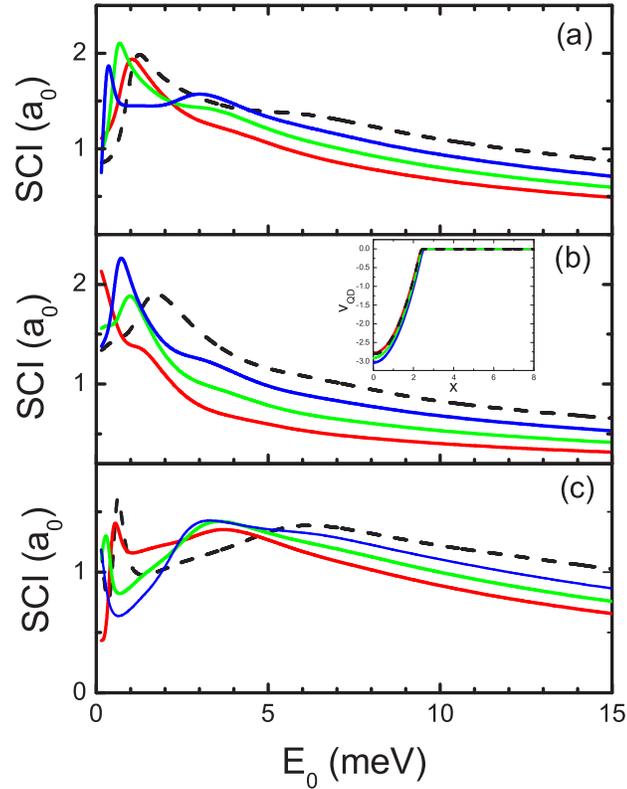


Figura 3.18: Seção de choque integral (SCI) elástica em função da energia do elétron incidente E_0 , para o espalhamento por pelo potencial (a) estático (b) do singlete e (c) do tripleto. A curva preta tracejada corresponde aos parâmetros ($\hbar\omega_0 = 5$ meV e $R_0 = 35$ nm), a vermelha ($\hbar\omega_0 = 3$ meV e $R_0 = 45$ nm), a verde ($\hbar\omega_0 = 3$ meV e $R_0 = 46$ nm) e a azul ($\hbar\omega_0 = 3$ meV e $R_0 = 47$ nm). A figura inserida mostra os respectivos potenciais adimensionais do QD em função da distância adimensional x .

reescalar este potencial deixando-o adimensional, ou seja, $v_{QD} = (x^2 - x_0^2)/2$ onde $v_{QD} = V_{QD}/\hbar\omega_0$, $x = r/a_0$ e $x_0 = R_0/a_0$. O gráfico inserido na Fig. 3.18 apresenta o potencial adimensional v_{QD} em função de x para os mesmos valores de $\hbar\omega_0$ e R_0 usados nos cálculos das SCI. A partir deste gráfico inserido na Fig. 3.18 vemos, por exemplo, que o potencial adimensional com os parâmetros $\hbar\omega_0 = 3$ meV e $R_0 = 45$ nm (curva vermelha) é praticamente igual ao potencial adimensional com os parâmetros $\hbar\omega_0 = 5$ meV para $R_0 = 35$ nm (curva preta tracejada). Desta

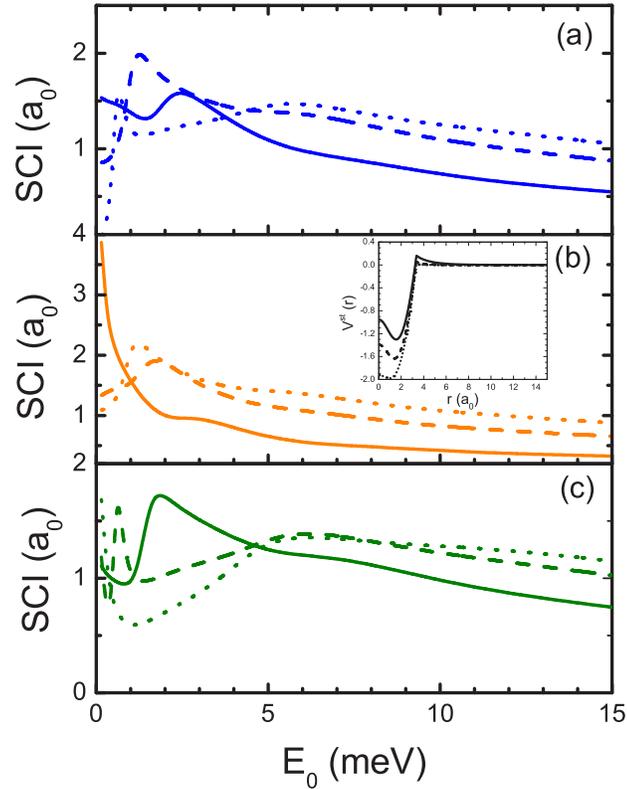


Figura 3.19: Seção de choque integral (SCI) elástica em função da energia do elétron incidente E_0 , para o espalhamento por pelo potencial (a) estático (b) do singleto e (c) do tripleto para vários diferentes valores de λ . A curva sólida corresponde à $\lambda = 0.5/a_0$, a tracejada à $\lambda = 1/a_0$ e a curva pontilhada à $\lambda = 2/a_0$. A figura inserida mostra os respectivos potenciais estáticos.

maneira, também podemos perceber que a SCI para $\hbar\omega_0 = 3$ meV e $R_0 = 35$ nm é semelhante ao caso $\hbar\omega_0 = 5$ meV e $R_0 = 35$ nm. Concluímos então que a mudança em $\hbar\omega_0$ reescala a energia e comprimento do QD e para cada valor de $\hbar\omega_0$ existe um correspondente valor de R_0 que faz com que as SCI de ambos sejam semelhantes. A Fig. 3.19 apresenta as SCI elástica para o espalhamento pelo potencial (a) estático (b) do singleto e (c) do tripleto para $\lambda = 0.5/a_0$ (curva sólida), $\lambda = 1/a_0$ (curva tracejada) e $\lambda = 2/a_0$ (curva pontilhada) com os parâmetros do QD iguais a $\hbar\omega_0 = 5$ meV e $R_0 = 35$ nm. A blindagem modifica consideravelmente o potencial estático, como pode ser visto no gráfico inserido

na Fig. 3.19 e conseqüentemente as SCI são distintas.

3.6.3 Espalhamento multi-canal

Quando se considera o espalhamento por três canais temos nove possibilidades de espalhamento, ou seja, o elétron incidente entra com energia $E_0 = \hbar^2 k_i^2 / 2m^*$ e pode sair com $\frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} + \varepsilon_i - \varepsilon_f$, com i e $f = 1, 2$ e 3 . Se $\varepsilon_f = \varepsilon_i$ temos o espalhamento elástico, se $\varepsilon_f > \varepsilon_i$ temos excitação e se $\varepsilon_f < \varepsilon_i$ o decaimento.

No nosso caso, como $\varepsilon_2 = \varepsilon_3$ a probabilidade de excitar ou decair para qualquer um destes dois estados é exatamente a mesma. Desta maneira, calculamos a

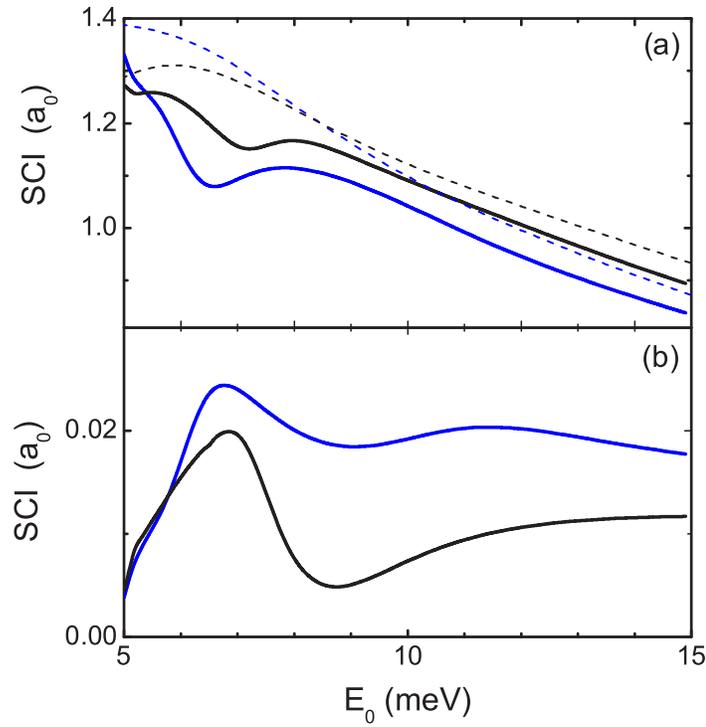


Figura 3.20: Seção de choque integral (SCI) para o espalhamento por três canais em função da energia do elétron incidente E_0 com $R_0 = 35$ nm e $\hbar\omega_0 = 5$ meV, para (a) o canal elástico e (b) o canal que promove a excitação do estado fundamental para o primeiro excitado ($l = \pm 1$). A curva preta (azul) mostra a SCI para o espalhamento não-polarizado (sem troca). As curvas tracejadas são as respectivas SCI para o espalhamento considerando somente um canal.

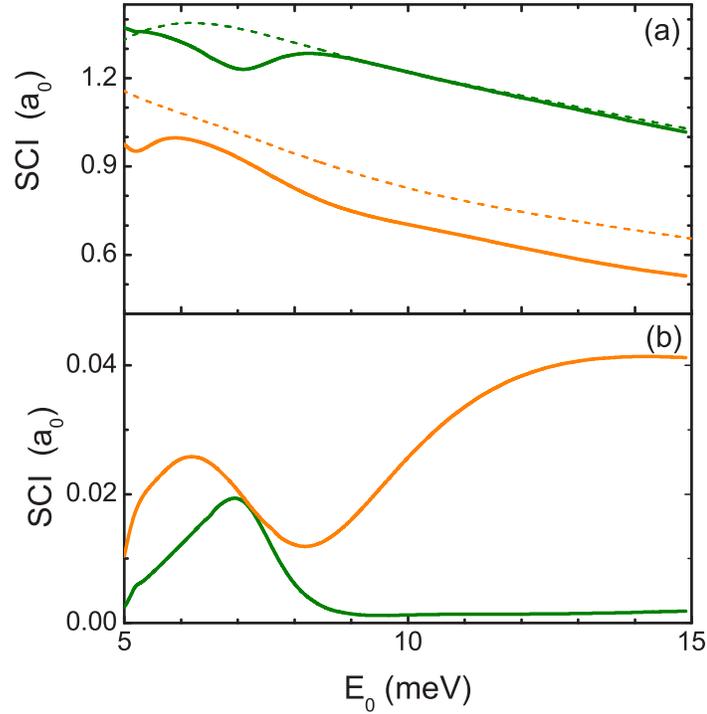


Figura 3.21: Seção de choque integral (SCI) para o espalhamento por três canais em função da energia do elétron incidente E_0 com $R_0 = 35$ nm e $\hbar\omega_0 = 5$ meV, para (a) o canal elástico e (b) o canal de excitação do estado fundamental para o primeiro excitado ($l = \pm 1$). A curva laranja (verde) mostra a SCI para o singlete (triplete). As curvas tracejadas são as respectivas SCI para o espalhamento considerando somente um canal.

seção de choque de espalhamento pelo canal elástico como também pelo canal de excitação de $\varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon_2$. A Fig. 3.20 mostra a SCI para o espalhamento pelo canal elástico (a) e pelo canal de excitação (b). A curva sólida preta (azul) representa o espalhamento pelo potencial não-polarizado (estático) e as curvas tracejadas representam as respectivas SCI quando se considera somente um canal. Pode-se ver que para $E_0 \approx 7$ meV as SCI do canal de excitação na Fig. 3.20(b) apresentam um máximo e desta maneira o canal elástico Fig. 3.20(a) exhibe um mínimo, fruto da conservação da corrente de probabilidade. Para $E_0 > 8$ meV o comportamento da SCI da Fig. 3.20(a) é muito parecida com aquela que só considera um canal

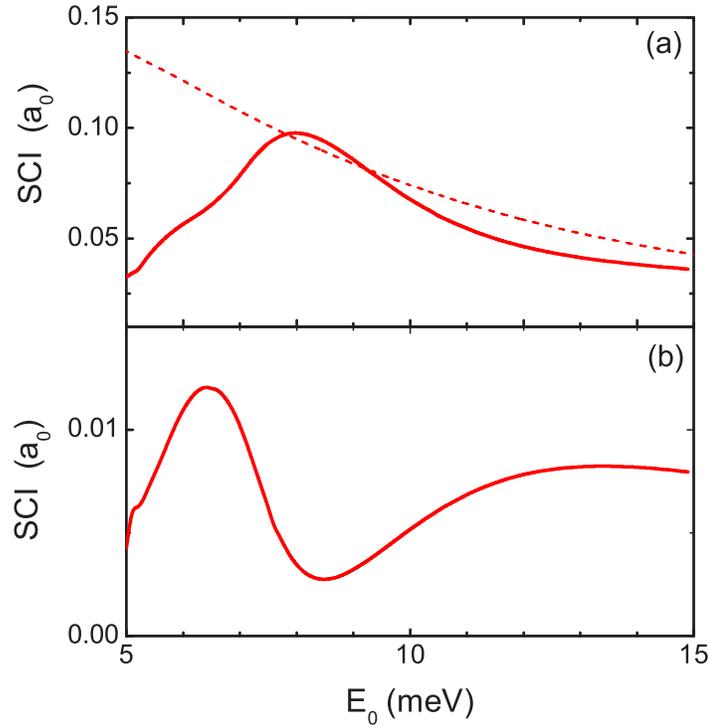


Figura 3.22: Seção de choque integral (SCI) de *spin-flip* em função da energia do elétron incidente E_0 com $R_0 = 35$ nm e $\hbar\omega_0 = 5$ meV, para (a) o canal elástico e (b) o canal que promove a excitação do estado fundamental para o primeiro excitado ($l = \pm 1$). A curva tracejada é a respectiva SCI para o espalhamento considerando somente um canal.

de espalhamento (linhas tracejadas).

Na Fig. 3.21 é mostrada a SCI para o espalhamento por três canais, onde a curva sólida verde (laranja) representa o espalhamento pelo potencial do tripleto (singleto) e as curvas tracejadas representam as respectivas SCI quando considera-se somente um canal. No caso do espalhamento pelo tripleto verifica-se que quando $E_0 > 9$ meV o espalhamento elástico [Fig. 3.21(a)] por três canais fica igual ao por um canal e conseqüentemente a probabilidade de excitação é praticamente nula [Fig. 3.21(b)]. No caso do singleto o comportamento é o contrário, ou seja, quando $E_0 > 9$ meV a probabilidade de excitação começa a aumentar [Fig. 3.21(b)], mostrando desta forma que o espalhamento pode ser completa-

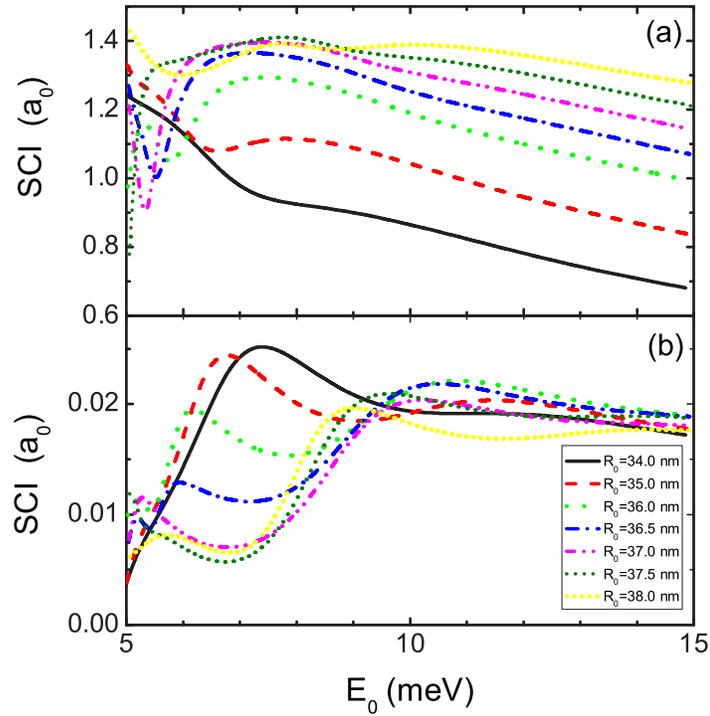


Figura 3.23: Seção de choque integral (SCI) para o espalhamento por três canais considerando o potencial estático em função da energia do elétron incidente E_0 , para (a) o canal elástico e (b) o canal que promove a excitação do estado fundamental para o primeiro excitado com momentum angular $l = \pm 1$. Consideramos diferentes tamanhos do QD com $\hbar\omega_0 = 5$ meV. A figura inserida mostra que cor corresponde à que valor de R_0 .

mente diferente dependendo do estado de spin dos elétrons.

Na Fig. 3.22 é mostrada a SCI de *spin-flip* para o espalhamento por três canais, onde a curva sólida representa o espalhamento pelo (a) canal elástico e (b) canal de excitação. A curva tracejada representa a respectiva SCI de *spin-flip* quando se considera apenas um canal. A SCI de *spin-flip* para o canal elástico apresenta um máximo para $E_0 \approx 8$ meV enquanto que para o canal de excitação aparece um mínimo neste mesmo intervalo de energia. Verificamos também que para $E_0 > 9$ meV a seção de choque de *spin-flip* elástica para 3 canais é similar a de um canal (curva tracejada).

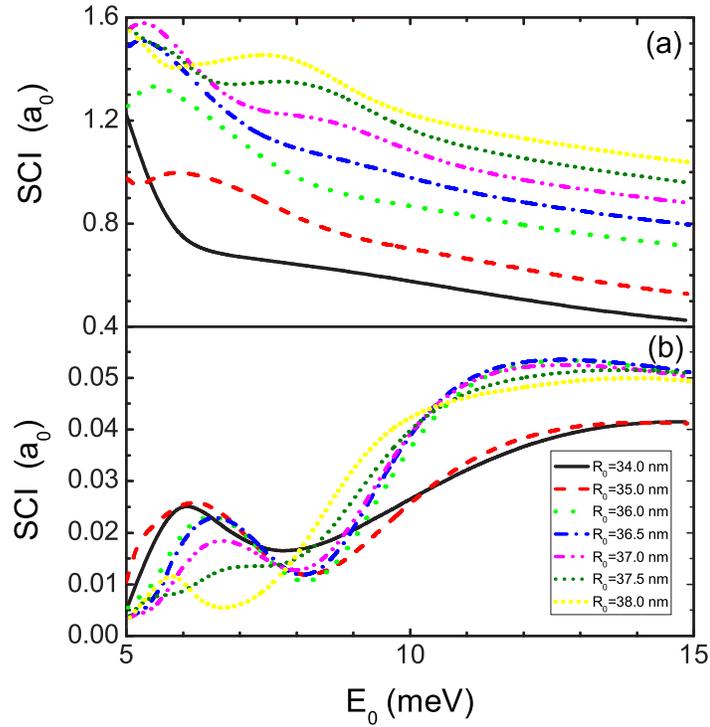


Figura 3.24: Seção de choque integral (SCI) para o espalhamento por três canais considerando o potencial do singleto em função da energia do elétron incidente E_0 , para (a) o canal elástico e (b) o canal que promove a excitação do estado fundamental para o primeiro excitado com momentum angular $l = \pm 1$. Consideramos diferentes tamanhos do QD com $\hbar\omega_0 = 5$ meV. A figura inserida mostra que cor corresponde à que valor de R_0 .

As Figs. (3.23, 3.24 e 3.25) apresentam as seções de choque para três canais, variando o tamanho do QD $R_0 = 34, 35, 36, 36.5, 37, 37.5$ e 38 nm com $\hbar\omega_0 = 5$ meV para o potencial estático, para o potencial do singleto e do tripleto, respectivamente. Da mesma forma que acontece no espalhamento por um canal, quando variamos o tamanho do QD os máximos do canal elástico mudam de posição conforme a variação de R_0 e se refletem como mínimos no canal de excitação e vice-versa.

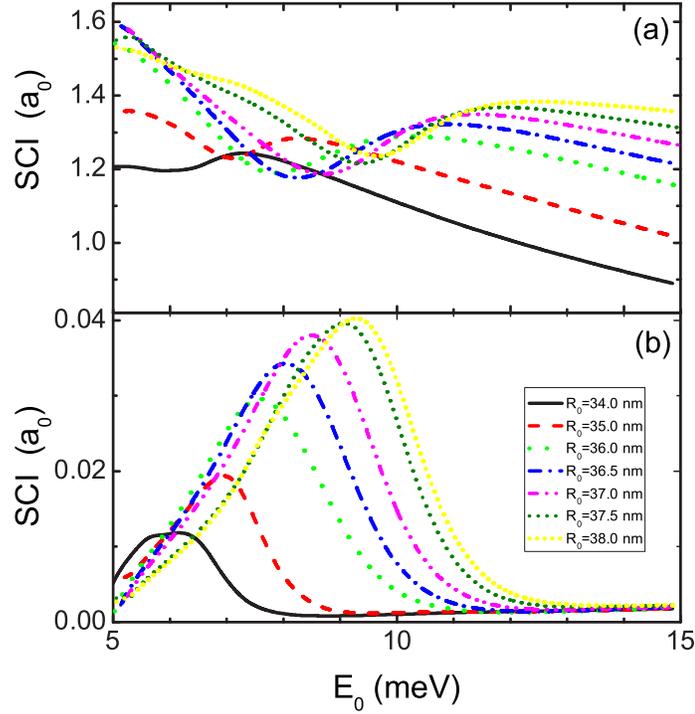


Figura 3.25: Seção de choque integral (SCI) para o espalhamento por três canais considerando o potencial do tripleto em função da energia do elétron incidente E_0 , para (a) o canal elástico e (b) o canal que promove a excitação do estado fundamental para o primeiro excitado com momentum angular $l = \pm 1$. Consideramos vários diferentes tamanhos do QD com $\hbar\omega_0 = 5$ meV. A figura inserida mostra que cor corresponde à que valor de R_0 .

3.6.4 Espalhamento pelo QD confinado

A condutância considerando diferentes tamanhos para o ponto quântico $R_0=35$ nm, $R_0=40$ nm, $R_0=45$ nm e $R_0 = 50$ nm e $\hbar\omega_0 =5$ meV são apresentadas nas Figs. (3.26, 3.27, 3.28 e 3.29). Nestas figuras variamos o alcance do potencial de Coulomb, onde as curvas sólidas se referem à $\lambda = 0.1a_0$ e as curvas tracejadas à $\lambda = 1/a_0$. Estas figuras também são divididas em três partes. Na parte (a) destas figuras, apresentamos a condutância quando consideramos o espalhamento pelo potencial do QD (curvas cinzas pontilhadas), pelo potencial estático (curvas azuis) e pelo potencial não-polarizado (curvas pretas). As diferenças entre

a condutância com os dois elétrons formando um singlete ou um tripleto, obtidas pelas Eqs. (3.96 e 3.97), são apresentadas na parte (b) destas figuras pelas curvas laranja e verde, respectivamente. Também nestas figuras apresentamos a condutância de *spin-flip* (curvas vermelhas) na parte (c), calculada através da Eq. (3.99). Identificamos em todas estas figuras (3.26, 3.27, 3.28 e 3.29) o aparecimento de ressonâncias. Este tipo de ressonância aparece, por exemplo no problema de transmissão em um poço quântico. E estas ressonâncias são proeminentes da interferência destrutiva entre as ondas refletidas em $x = -R_0$ com as ondas refletidas uma, duas, três, ... vezes em $x = R_0$, que no caso do poço quântico possuem a mesma condição de ressonância de um interferômetro de Fabry-Perot [70].

Para $R_0 = 35$ nm, vemos que o efeito na mudança no alcance do potencial de Coulomb é significativo (Fig. 3.26(a)). Este fato pode ser facilmente entendido pelo gráfico inserido na Fig. 3.26 que mostra que o potencial estático varia consideravelmente com a mudança em λ . Pode-se ver também na Fig. 3.26(b) que a condutância para o estado singlete é distinta do estado tripleto, mostrando que o potencial de troca traz efeitos significativos para a condutância. Como já dito anteriormente, a condutância de *spin-flip* é dada pela diferença entre as matrizes T do tripleto e singlete, desta maneira a condutância de *spin-flip* (Fig. 3.26(c)), mostra um pico estreito e outro largo para $\lambda = 0.1/a_0$ e somente um pico largo para $\lambda = 1/a_0$. Podemos notar que a posição destes picos é relacionada com a diferença entre a condutância do singlete e do tripleto.

Para $R_0 = 40$ nm, vemos que o efeito na mudança no alcance do potencial de Coulomb é pequena (Fig. 3.27(a)), pois o potencial estático varia pouco com a mudança em λ , como pode ser visto pelo gráfico inserido na Fig. 3.27. Nota-se também na Fig. 3.27(b) que a condutância para o estado singlete é parecida com a do estado tripleto, mostrando uma diferença em $E_0 = 4.16$ meV onde aparece uma ressonância. A condutância de *spin-flip* (Fig. 3.27(c)), mostra um pico para $\lambda = 0.1/a_0$ exatamente onde a condutância do singlete e tripleto são distintas ($E_0 = 4.16$ meV).

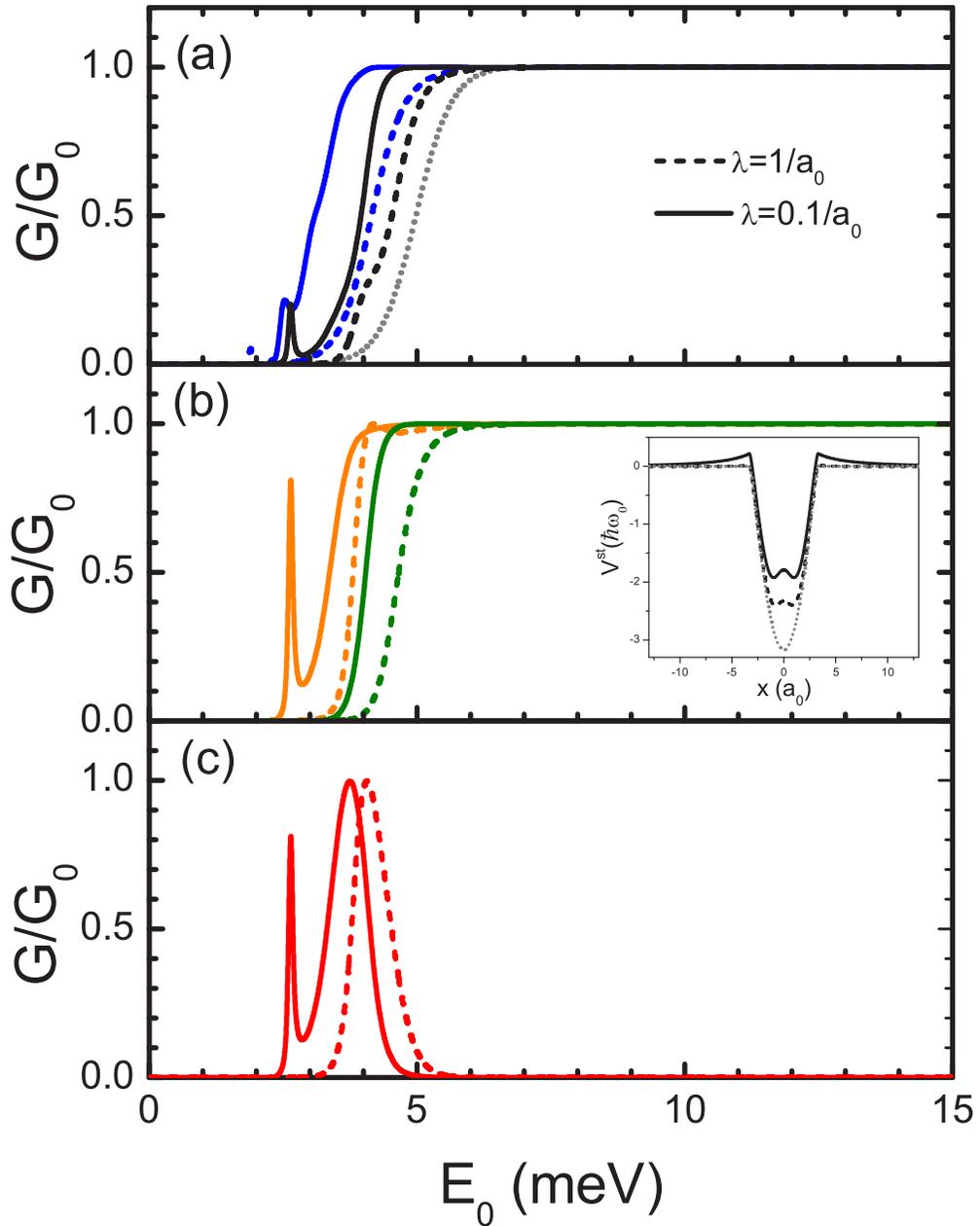


Figura 3.26: Condutância para $R_0 = 35$ nm e $\hbar\omega_0 = 5$ meV com $\lambda = 0.1/a_0$ (curva sólida) e $\lambda = 1/a_0$ (curva tracejada), considerando os diferentes casos: (a) potencial sem elétron (curva cinza pontilhada), potencial sem troca (curva azul) e potencial não-polarizado (curva preta), (b) o potencial do singleto (laranja) e o potencial do tripleto (verde) e (c) *spin-flip*. A figura inserida mostra o potencial estático para $\lambda = 0.1a_0$ (curva sólida), $\lambda = 1/a_0$ (curva tracejada) e sem elétron (curva cinza pontilhada).

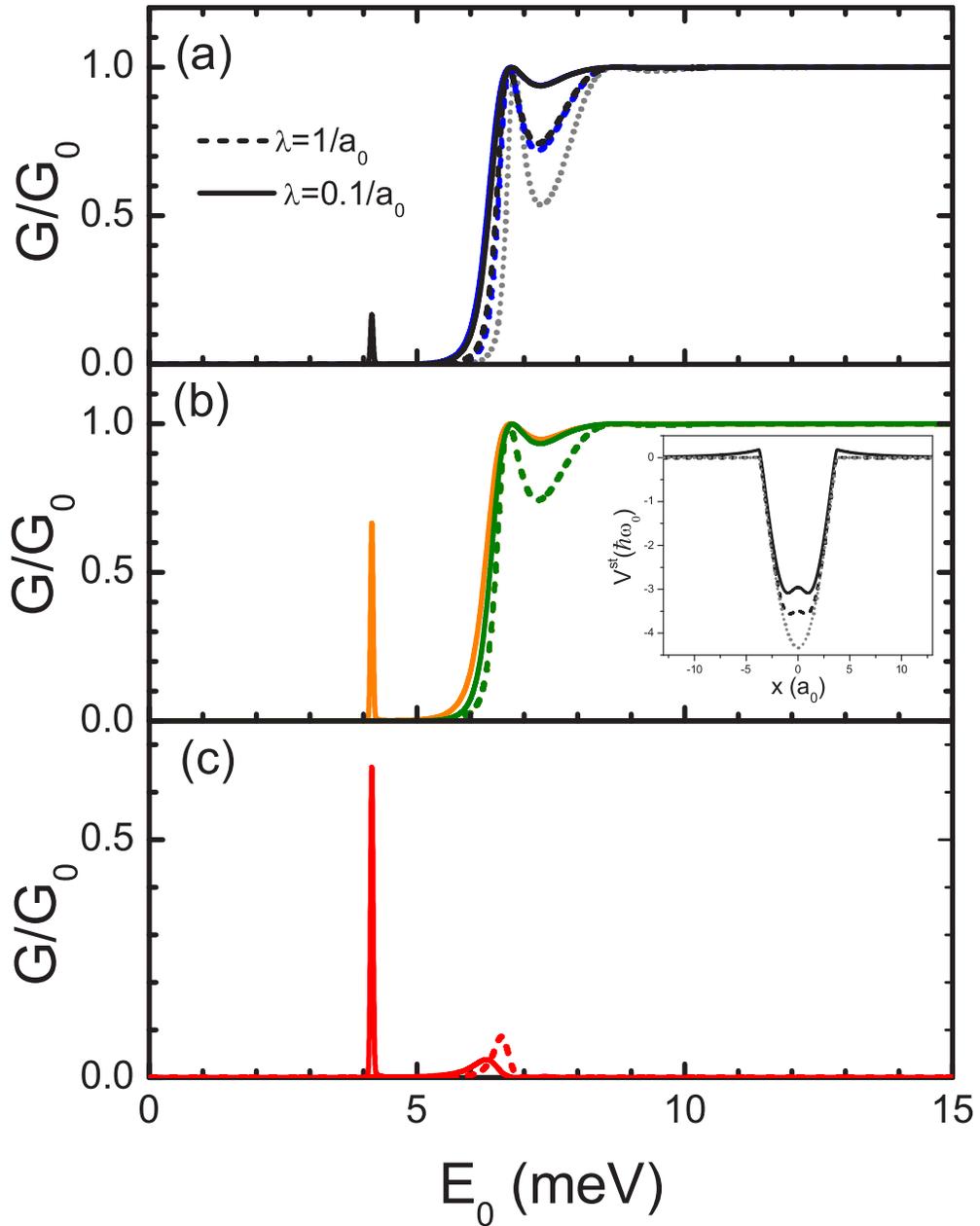


Figura 3.27: Condutância para $R_0 = 40$ nm e $\hbar\omega_0 = 5$ meV com $\lambda = 0.1/a_0$ (curva sólida) e $\lambda = 1/a_0$ (curva tracejada), considerando os diferentes casos: (a) potencial sem elétron (curva cinza pontilhada), potencial sem troca (curva azul) e potencial não-polarizado (curva preta), (b) o potencial do singleto (laranja) e o potencial do tripleto (verde) e (c) *spin-flip*. A figura inserida mostra o potencial estático para $\lambda = 0.1a_0$ (curva sólida), $\lambda = 1/a_0$ (curva tracejada) e sem elétron (curva cinza pontilhada).

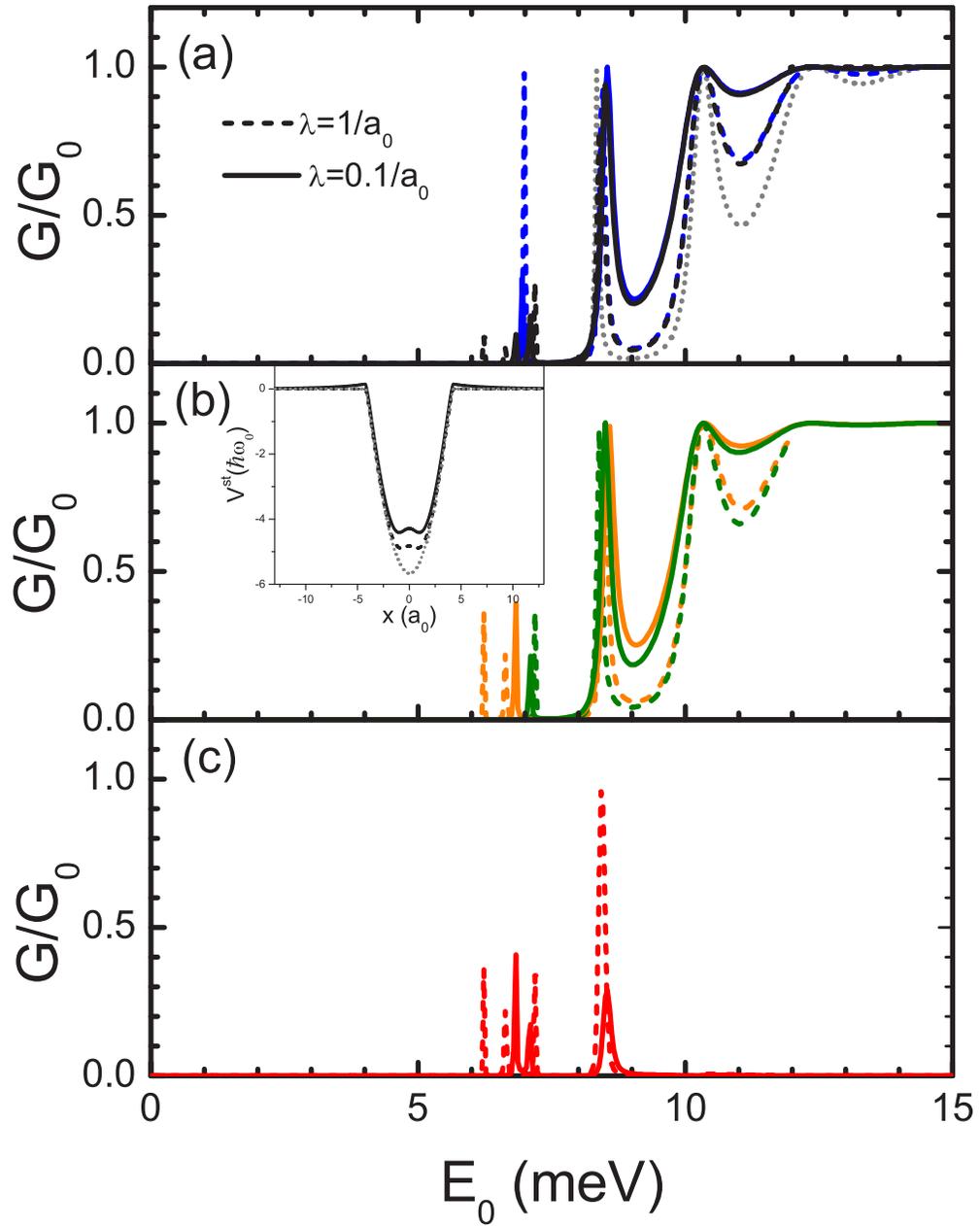


Figura 3.28: Condutância para $R_0 = 45$ nm e $\hbar\omega_0 = 5$ meV com $\lambda = 0.1/a_0$ (curva sólida) e $\lambda = 1/a_0$ (curva tracejada), considerando os diferentes casos: (a) potencial sem elétron (curva cinza pontilhada), potencial sem troca (curva azul) e potencial não-polarizado (curva preta), (b) o potencial do singleto (laranja) e o potencial do tripleto (verde) e (c) *spin-flip*. A figura inserida mostra o potencial estático para $\lambda = 0.1a_0$ (curva sólida), $\lambda = 1/a_0$ (curva tracejada) e sem elétron (curva cinza pontilhada).

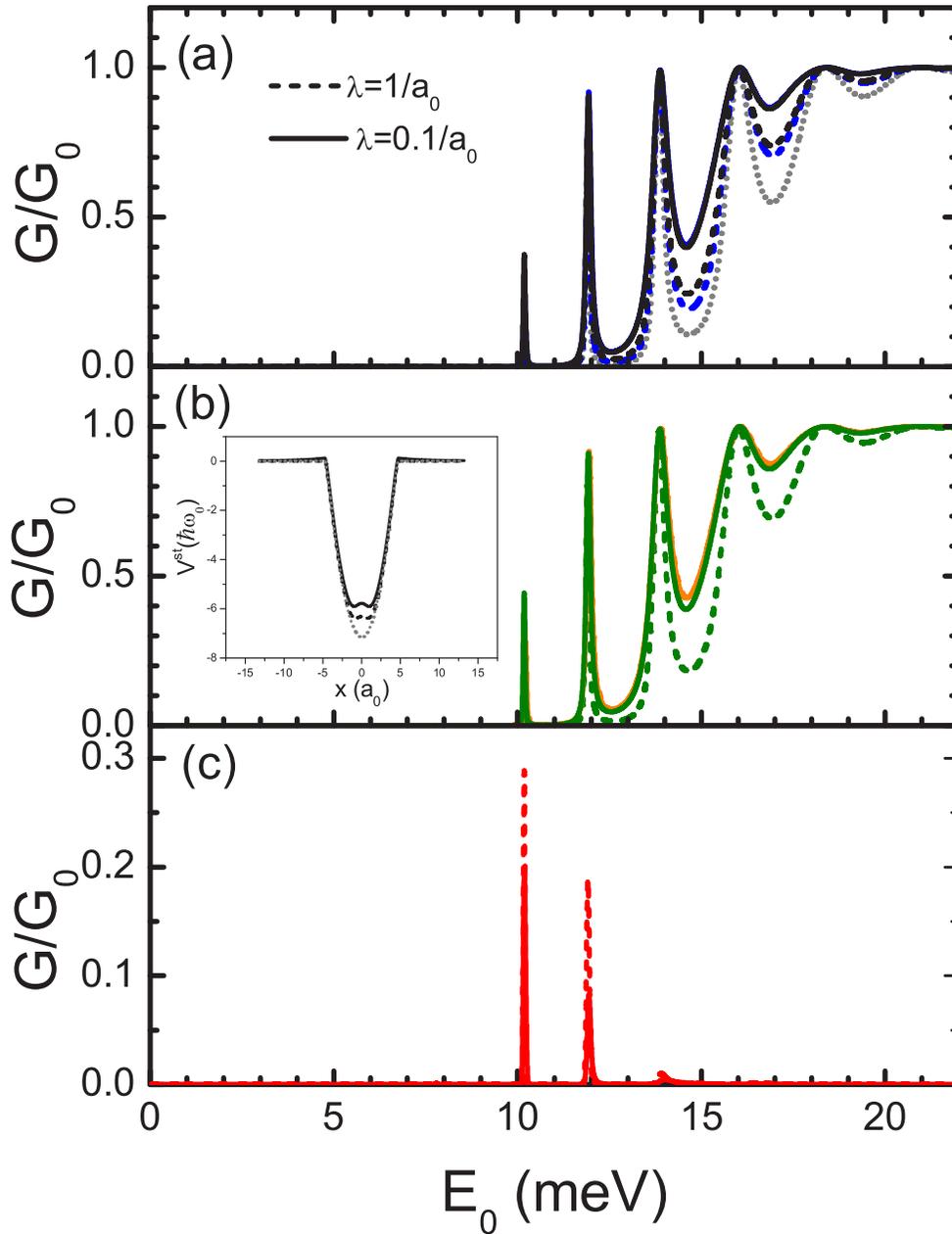


Figura 3.29: Condutância para $R_0 = 50$ nm e $\hbar\omega_0 = 5$ meV com $\lambda = 0.1/a_0$ (curva sólida) e $\lambda = 1/a_0$ (curva tracejada), considerando os diferentes casos: (a) potencial sem elétron (curva cinza pontilhada), potencial sem troca (curva azul) e potencial não-polarizado (curva preta), (b) o potencial do singleto (laranja) e o potencial do tripleto (verde) e (c) *spin-flip*. A figura inserida mostra o potencial estático para $\lambda = 0.1a_0$ (curva sólida), $\lambda = 1/a_0$ (curva tracejada) e sem elétron (curva cinza pontilhada).

Com o aumento de R_0 percebe-se que os efeitos do aumento do alcance do potencial de Coulomb são menores ainda (Fig. 3.28(a) e Fig. 3.29(a)), pois o potencial estático é dominado pelo potencial do QD e varia pouco com a inclusão do potencial direto, como pode ser visto pelos gráficos inseridos nas Figs. (3.28 e 3.29).

Quando $R_0 = 45$ nm, podemos ver a importância dos efeitos de troca que fazem com que a ressonância em $E_0 = 6.93$ meV para o potencial estático (curva azul na Fig. 3.28(a)) se abra em duas (três) ressonâncias para $\lambda = 0.1/a_0$ ($\lambda = 1/a_0$) para o potencial não-polarizado (curva preta na Fig. 3.28(a)). As diferentes posições destes picos estão diretamente relacionadas com as condutâncias para o singleto e tripleto (Fig. 3.28(b)), que por sua vez também afetam a condutância de *spin-flip* (Fig. 3.28(c)). Finalmente, vemos que o potencial do QD domina praticamente todos os efeitos quando $R_0 = 50$ nm (Fig. 3.29).

3.7 Conclusão

Neste capítulo apresentamos um modelo teórico para calcular o transporte através de um ponto quântico com N -elétrons confinados. Aplicamos este modelo ao caso em que $N = 1$, para um ponto quântico bidimensional com e sem confinamento na direção lateral. No caso em que não há confinamento lateral calculamos as seções de choque diferencial e integral para um e três canais acoplados. Além disso, apresentamos as seções de choque não-polarizada e de *spin-flip*. Verificamos o aparecimento de ressonâncias de forma nas seções de choque integral. A condutância também pode ser determinada quando o ponto quântico possui o confinamento lateral. Neste caso, demonstramos que a condutância para dois elétrons formando um estado de spin tripleto ou singleto é diferente. Também apresentamos o cálculo da condutância de *spin-flip*, que por analogia à teoria quântica de espalhamento pode ser extraída através das amplitudes de transmissão do singleto e do tripleto. Demonstramos que os efeitos de troca são importantes e não podem ser desprezados no espalhamento eletrônico.

Capítulo 4

Conclusão e perspectivas

O objetivo desta tese foi investigar os efeitos da interação elétron-elétron na estrutura eletrônica de dois anéis quânticos acoplados e nas propriedades de transporte através de um ponto quântico contendo N -elétrons confinados. No capítulo 2 nós mostramos como foi feito o cálculo do estado fundamental para dois anéis quânticos acoplados, incluindo-se o tunelamento entre os anéis. Utilizamos o formalismo de Kohn-Sham para efetuar estes cálculos e mostramos que o estado fundamental varia de acordo com a distância entre os anéis e os seus respectivos raios. Construimos um diagrama de fases (configurações) eletrônicas em função destas grandezas que identifica qual é o estado fundamental para uma determinada escolha destes parâmetros. A energia de adição também foi calculada e esperamos que em breve possa ser comparada com os resultados experimentais como foi feito para CQDs [31]. Pretendemos no futuro, estudar a estrutura eletrônica dependente do campo magnético, utilizando a teoria do funcional densidade dependente spin e corrente (CSDFT¹). Em anéis quânticos pode-se observar o efeito Aharonov-Bohm e correntes persistentes [71, 72] na presença de campos magnéticos. Julgamos que esta seria uma proposta interessante para esta área de pesquisa, contribuindo para o avanço nos estudos sobre anéis quânticos acoplados.

No capítulo 3 apresentamos um modelo teórico que inclui a interação de Coulomb entre o elétron incidente e os N -elétrons confinados dentro do QD para

¹CSDFT=*Current Spin Density Functional Theory*.

se determinar as propriedades de transporte usando a teoria de espalhamento. Aplicamos este modelo para o caso mais simples, onde existe somente um elétron dentro do QD e calculamos as seções de choque elástica, inelástica e de *spin-flip* considerando os efeitos de troca. Também obtivemos a condutância para o ponto quântico confinado. As propriedades de transporte obtidas através da teoria de colisão elétron-alvo podem ajudar a entender os experimentos recentes e também podem ser utilizadas para novas aplicações em nano-estruturas semicondutoras. Nós pretendemos no futuro estudar: (1) o espalhamento através de um ponto quântico levando em conta o acoplamento spin-órbita, o que pode ser feito reformulando a teoria desenvolvida por S. Nagano [73] em duas dimensões, (2) o espalhamento através de dois pontos quânticos acoplados, (3) os efeitos da inclusão de um campo magnético, perpendicular ao QD, na condutância, como feito por V. Gudmundsson [50], (4) as consequências de mais elétrons confinados dentro do QD, (5) a condutância e o espalhamento através de um anel quântico, (6) a condutância através de um ponto de contato quântico (*quantum point contact*), o qual pode ser utilizado como sensor de estados [74–76] e (7) o espalhamento assistido por laser, como já utilizado para uma molécula de CO_2 [77]. Acreditamos que estas novas aplicações possam contribuir de forma significativa para o estudo de transporte através de nano-estruturas semicondutoras.

Referências Bibliográficas

- [1] D. L. Huffaker, G. Park, Z. Zou, O. B. Shchekin, and D. G. Deppe, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 2564 (1998).
- [2] G. Burkard, D. Loss, and D. P. DiVincenzo, *Phys. Rev. B* **59**, 2070 (1999).
- [3] D. Loss and D. P. Divincenzo, *Phys. Rev. A* **57**, 120 (1998).
- [4] H. P. JacakL' and A. Wojs, *Quantum Dots* (Springer, Berlim, 1998).
- [5] H. Grabert and M. H. Devoret, *Single Charge Tunnelling* (Plenum, New York, 1991).
- [6] B. L. Johnson and G. Kirczenow, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 672 (1992).
- [7] D. G. Austing, T. Honda, and S. Tarucha, *Jap. J. Appl. Phys.* **34**, 1320 (1995).
- [8] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, and L. P. Kouwenhoven, *Science* **281**, 540 (1998).
- [9] L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, and S. Tarucha, *Rep. Prog. Phys.* **64**, 701 (2001).
- [10] <http://pages.unibas.ch/phys-meso/Pictures/pictures.html>.
- [11] R. Held, S. Lüscher, T. Heinzel, K. Ensslin, and W. Wegscheider, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 1134 (1999).
- [12] A. Fuhrer, S. Lüscher, T. Ihn, T. Heinzel, K. Ensslin, W. Wegscheider, and M. Bichler, *Nature* **413**, 822 (2001).

-
- [13] J. M. García, G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmidt, T. Ngo, J. L. Feng, A. Lorke, J. Kotthaus, and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2014 (1997).
- [14] A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223 (2000).
- [15] Z. Gong, Z. C. Niu, S. S. Huang, Z. D. Fang, B. Q. Sun, and J. B. Xia, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 093116 (2005).
- [16] D. Granados, J. M. García, T. Ben, and S. I. Molina, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 071918 (2005).
- [17] P. Offermans, P. M. Koenraad, J. H. Wolter, D. Granados, J. M. García, V. M. Fomin, V. N. Gladilin, and J. T. Devreese, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 131902 (2005).
- [18] T. Ota, T. Hatano, S. Tarucha, H. Z. Song, Y. Nakata, T. Miyazawa, T. Ohshima, and N. Yokoyama, *Physica E* **19**, 210 (2003).
- [19] T. Ota, M. Rontani, S. Tarucha, Y. Nakata, H. Z. Song, T. Miyazawa, T. Usuki, M. Takatsu, and N. Yokoyama, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 236801 (2005).
- [20] S. Tarucha, D. G. Austing, T. Honda, R. J. van der Hage, and L. P. Kouwenhoven, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3613 (1996).
- [21] M. Macucci, K. Hess, and G. J. Iafrate, *Phys. Rev. B* **48**, 17354 (1993).
- [22] S. Nagaraja, P. Matagne, V.-Y. Thean, J.-P. Leburton, Y.-H. Kim, and R. M. Martin, *Phys. Rev. B* **56**, 15752 (1997).
- [23] A. Angelucci and A. Tagliacozzo, *Phys. Rev. B* **56**, 7088 (1997).
- [24] M. Koskinen, M. Manninen, and S. M. Reimann, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1389 (1997).
- [25] I. H. Lee, V. Rao, R. M. Martin, and J.-P. Leburton, *Phys. Rev. B* **57**, 9035 (1998).

- [26] K. Hirose and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. B* **59**, 4604 (1999).
- [27] M. Rontani, S. Amaha, K. Muraki, F. Manghi, E. Molinari, S. Tarucha, and D. G. Austing, *Phys. Rev. B* **69**, 085327 (2004).
- [28] D. G. Austing, T. Honda, K. Muraki, Y. Tokura, and S. Tarucha, *Physica B(Amsterdam)* **249-251**, 206 (1998).
- [29] B. Partoens and F. M. Peeters, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4433 (2000).
- [30] T. Ota, K. Ono, M. Stopa, T. Hatano, S. Tarucha, H. Z. Song, Y. Nakata, T. Miyazawa, T. Ohshima, and N. Yokoyama, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 066801 (2004).
- [31] S. M. Reimann and M. Manninen, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1283 (2002).
- [32] A. Emperador, M. Pi, Manuel Barranco, and A. Lorke, *Phys. Rev. B* **62**, 4573 (2000).
- [33] J. Simonin, C. R. Proetto, Z. Barticevic, and G. Fuster, *Phys. Rev. B* **70**, 205305 (2004).
- [34] V. Fock, *Z. Phys.* **47**, 446 (1928).
- [35] C. Darwin, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **27**, 86 (1930).
- [36] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York, 1953).
- [37] B. Tanatar and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **39**, 5005 (1989).
- [38] Y. Tokura, D. G. Austing, and S. Tarucha, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 6023 (1999).
- [39] D. G. Austing, S. Tarucha, H. Tamura, K. Muraki, F. Ancilotto, M. Barranco, A. Emperador, R. Mayol, and M. Pi, *Phys. Rev. B* **70**, 045324 (2004).
- [40] J. C. Lin and G.-Y. Guo, *Phys. Rev. B* **65**, 035304 (2001).

- [41] B. H. Bransden and M. R. C. Mc Dowell, *Phys. Rep.* **30**, 207 (1977).
- [42] N. F. Lane, *Rev. Mod. Phys.* **52**, 29 (1980).
- [43] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 731 (1997).
- [44] P. Zhang, Qi-Kun Xue¹, Y. Wang, and X. C. Xie, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 286803 (2002).
- [45] Y. Meir, N. S. Wingreen, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2601 (1993).
- [46] W. G. van der Weil, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, T. Fujisawa, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1 (2003).
- [47] D. Weinmann, W. Häusler, and B. Kramer, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 984 (1995).
- [48] C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **44**, 1646 (1991).
- [49] Y. Meir and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2512 (1992).
- [50] V. Gudmundsson, Y.-Y. Lin, C.-S. Tang, V. Moldoveanu, J. H. Bardarson, and A. Manolescu, *Phys. Rev. B* **71**, 235302 (2005).
- [51] J. H. Bardarson, I. Magnusdottir, G. Gudmundsdottir, C.-S. Tang, A. Manolescu, and V. Gudmundsson, *Phys. Rev. B* **70**, 245308 (2004).
- [52] V. Vargiamidis, O. Valassiades, and D. S. Kyriakos, *Phys. Stat. Sol. (b)* **236**, 597 (2003).
- [53] V. Vargiamidis and H. M. Polatoglou, *Phys. Rev. B* **71**, 075301 (2005).
- [54] A. M. Satanin and V. B. Shtenberg, *JETP Lett.* **75**, 175 (2002).
- [55] A. Szabo and N. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry* (Macmillan Publishing, New York, 1982).
- [56] S. K. Adhikari, *Am. J. Phys.* **54**, 362 (1986).
- [57] I. R. Lapidus, *Am. J. Phys.* **50**, 45 (1982).

- [58] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (John Wiley and Sons, Inc., New York, 1970).
- [59] D. S. Fisher and P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **23**, 6851 (1981).
- [60] Y. Imry and R. Landauer, *Rev. Mod. Phys.* **71**, s306 (1999).
- [61] R. Landauer, *IBM J. Res.* **1**, 223 (1957).
- [62] R. Landauer, *Phil. Mag.* **21**, 863 (1970).
- [63] R. Landauer, *Z. Phys.* **B24**, 247 (1975).
- [64] M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, *Phys. Rev. B* **31**, 6207 (1985).
- [65] T. Hegemann, M. Oberste-Vorth, R. Vogts, and G. F. Hanne, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2968 (1991).
- [66] F. J. da Paixão, M.A.P. Lima, and V. McKoy, *Phys. Rev. A* **53**, 1400 (1996).
- [67] M. T. Lee, I. Iga, M. M. Fujimoto, and O. Lara, *J. Phys. B* **28**, L299 (1995).
- [68] E. M. S. Ribeiro, L.E. Machado, M.-T. Lee, and L.M. Brescansin, *Comput. Phys. Comm.* **136**, 117 (2001).
- [69] C. J. Joachain, *Quantum collision theory* (North-Holland, Amsterdam, 1975).
- [70] S. Gasiorowicz, *Quantum Physics* (John Wiley and Sons, Inc., New York, 1995).
- [71] Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
- [72] S. Viefers, P.S. Deo, S. M. Reimann, M. Manninen, and M. Koskinen, *Phys. Rev. B* **62**, 10668 (2000).
- [73] S. Nagano, *Phys. Rev. B* **50**, 7962 (1994).

-
- [74] T. Fujisawa, T. Hayashi, R. Tomita, and Y. Hirayama, *Science* **312**, 1634 (2006).
- [75] L. X. Zhang, J. P. Leburton, R. Hanson, and L. P. Kowenhoven, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 2628 (2004).
- [76] A. Vidan, M. Stopa, R. M. Westervelt, M. Hanson, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 156802 (2006).
- [77] N. J. Kylstra and C. J. Joachain, *Phys. Rev. A* **58**, R26 (1998).
- [78] M. I. Lubin, O. Heinonen, and M. D. Johnson, *Phys. Rev. B* **56**, 10373 (1997).

Apêndice A

A.1 Teoria do funcional densidade dependente de spin (SDFT)

Neste apêndice descrevemos a teoria do funcional densidade dependente de spin. Esta teoria é uma generalização da teoria do funcional densidade. O Hamiltoniano para um sistema de N elétrons sob a ação de um campo escalar $V(\mathbf{r})$ é igual a

$$H = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} \quad (\text{A.1.1})$$

onde

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \nabla^2 \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.1.2})$$

$$\hat{U} = -\frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}'), \quad (\text{A.1.3})$$

$$\hat{V} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} V_{\sigma}(\mathbf{r}) \hat{\rho}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.1.4})$$

Nestas expressões nós usamos os operadores de campo $\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$ e $\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$ para $\sigma = \uparrow, \downarrow$ e os operadores de densidade são definidos por:

$$\hat{\rho}_{\sigma}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.1.5})$$

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \hat{\rho}_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.1.6})$$

O potencial dependente de spin $V_{\sigma}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \pm \frac{1}{2} g \mu_B B(\mathbf{r})$, o qual é a soma do potencial escalar $V(\mathbf{r})$ com o dado pelo acoplamento da densidade de spin com o campo magnético através do termo Zeemann. O potencial $u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = e^2 / \epsilon_0^* |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$ dá a interação de Coulomb entre os elétrons.

Usando-se o princípio variacional podemos determinar a energia do estado fundamental através da seguinte equação para a energia:

$$E_{V_{\uparrow/\downarrow}}[\rho'_{\uparrow}, \rho'_{\downarrow}, \mathbf{j}'_p] = F[\rho'_{\uparrow}, \rho'_{\downarrow}, \mathbf{j}'_p] + \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} V_{\sigma}(\mathbf{r}) \hat{\rho}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.1.7})$$

onde

$$F[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow, \mathbf{j}'_p] = \langle \Psi[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow, \mathbf{j}'_p] | (\hat{T} + \hat{U}) | \Psi[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow, \mathbf{j}'_p] \rangle$$

o qual é o funcional universal que não depende dos potenciais externos.

A.2 O Formalismo Kohn-Sham

Para determinar a estrutura eletrônica de um sistema, ao invés de minimizar o funcional densidade, pode-se resolver um conjunto de equações de uma partícula auto-consistentemente conhecidas como equações de Kohn-Sham. As equações de Kohn-Sham são semelhantes as equações de Hartree-Fock, entretanto estas são formalmente exatas devido a inclusão do potencial de correlação. Definindo-se o funcional correlação e troca da seguinte forma:

$$F[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow] = T_s[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow] + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r} u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') + E_{xc}[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow]$$

onde

$$T_s[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow] \equiv \langle \Psi_0[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow] | \hat{T} | \Psi_0[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow] \rangle \quad (\text{A.2.8})$$

e $\Psi_0[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow]$ corresponde ao estado fundamental referente a $(\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow)$, numa versão não interagente do sistema. Agora nós temos que procurar pelo potencial efetivo de uma partícula $V_{s\sigma}(\mathbf{r})$ de um sistema de N elétrons não interagentes, o chamado sistema Kohn-Sham, com as densidades dadas por

$$\rho_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_\alpha |\varphi_{\sigma,\alpha}(\mathbf{r})|^2 \quad (\text{A.2.9})$$

calculadas através das soluções normalizadas da equação de Schrödinger

$$H_{KS\sigma} \varphi_{\sigma,\alpha}(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V_{s\sigma} \right] \varphi_{\sigma,\alpha}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\sigma,\alpha} \varphi_{\sigma,\alpha}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.2.10})$$

A energia funcional deste sistema Kohn-Sham H_{KS} é

$$E_{V_{s\uparrow/\downarrow}}^0[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow] = T_s[\rho'_\uparrow, \rho'_\downarrow] + \sum_\sigma \int d\mathbf{r} V_{s\sigma}(\mathbf{r}) \rho'_\sigma(\mathbf{r}) \quad (\text{A.2.11})$$

a qual será minimizada pelas mesmas densidades do sistema real interagente, por construção:

$$\begin{aligned} & \left. \frac{\delta(E_{V_{\uparrow/\downarrow}} - \mu[N - \int d\mathbf{r}\rho'(\mathbf{r})])}{\delta\rho'_\sigma(\mathbf{r})} \right|_{(\rho'_{-\sigma})} = \\ & = \left. \frac{\delta(E_{V_{s\uparrow/\downarrow}}^0 - \mu[N - \int d\mathbf{r}\rho'(\mathbf{r})])}{\delta\rho'_\sigma(\mathbf{r})} \right|_{(\rho'_{-\sigma})} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.2.12})$$

$$\left. \frac{\delta E_{V_{\uparrow/\downarrow}}}{\delta\rho'_\sigma(\mathbf{r})} \right|_{(\rho'_{\uparrow/\downarrow})} = \left. \frac{\delta E_{V_{s\uparrow/\downarrow}}^0}{\delta\rho'_\sigma(\mathbf{r})} \right|_{(\rho'_{\uparrow/\downarrow})} = 0 \quad (\text{A.2.13})$$

Substituindo-se as Eqs.(A.1.7) e (A.2.11) nas anteriores, obtemos:

$$V_H + \left. \frac{\delta E_{xc}}{\delta\rho'_\sigma} \right|_{(\rho'_{-\sigma})} + V_\sigma(\mathbf{r}) = V_{s\sigma}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.2.14})$$

Desta forma, o potencial efetivo $V_{s\sigma}$ é determinado através da equação acima. Definindo um potencial escalar de troca e correlação como sendo igual a

$$V_{xc}^\sigma(\mathbf{r}) = \left. \frac{\delta E_{xc}}{\delta\rho'_\sigma} \right|_{(\rho'_{-\sigma})} \quad (\text{A.2.15})$$

podemos obter as equações de Kohn-Sham, as quais são dadas por

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_\sigma(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}^\sigma(\mathbf{r}) \right] \varphi_{\sigma,\alpha}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\sigma,\alpha} \varphi_{\sigma,\alpha}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.2.16})$$

onde $V_H(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}')$.

A energia do estado fundamental é obtida substituindo-se a Eq.(A.1.7) em (A.2.11), que resulta na seguinte expressão:

$$\begin{aligned} E &= \sum_{\sigma\alpha} \varepsilon_{\sigma,\alpha} - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} V_H(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) \\ &+ E_{xc} - \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} V_{xc}^\sigma(\mathbf{r}) \rho_\sigma(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.2.17})$$

A.3 Local Density Approximation (LDA)

Para podermos resolver as equações de Kohn-Sham, precisamos de uma expressão para a energia de correlação e troca E_{xc} . Neste trabalho usamos a bem

conhecida aproximação LDA. A generalização desta aproximação para SDFT é

$$E_{xc}[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}] = \int d\mathbf{r} \varepsilon_{xc}(\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}) \rho(\mathbf{r}) \quad (\text{A.3.18})$$

Com campo magnético nulo a energia de troca e correlação por partícula é dada por [78] (com $\xi = (\rho_{\downarrow} - \rho_{\uparrow})/\rho$)

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xc}(\rho, \xi) &= \frac{-4\sqrt{2}}{3\pi r_s} [(1 + \xi)^{3/2} + 1 - \xi)^{3/2}] \\ &= \varepsilon_{xc}(\rho, \xi = 0) + f(\xi)[\varepsilon_{xc}(\rho, \xi = 1) - \varepsilon_{xc}(\rho, \xi = 0)] \end{aligned} \quad (\text{A.3.19})$$

com a função de interpolação

$$f(\xi) = \frac{(1 + \xi)^{3/2} + 1 - \xi)^{3/2} - 2}{2^{3/2} - 2} \quad (\text{A.3.20})$$

Usando-se os aproximantes de Padé, Tanatar e Ceperley [37] através de técnicas de Monte Carlo, fitaram a energia de correlação e troca por partícula para os casos não polarizado e totalmente polarizado, a qual é igual a

$$\varepsilon_c^{TC}(\rho, \xi) = a_0^{\xi} \frac{1 + a_1^{\xi} \sqrt{r_s}}{1 + a_1^{\xi} \sqrt{r_s} + a_2^{\xi} r_s + a_3^{\xi} r_s \sqrt{r_s}} \quad (\text{A.3.21})$$

com o parâmetro densidade adimensional $r_s = 1/\sqrt{\pi\rho(a_B^*)^2}$. Onde ρ é a densidade total do sistema e a_B^* é o raio de Bohr efetivo. Os parâmetros a_i^{ξ} são dados pela tabela (A.3).

	a_0	a_1	a_2	a_3
$\xi = 0$	-0.3568	1.1300	0.9052	0.4165
$\xi = 1$	-0.0515	340.5813	75.2293	37.0170

Apêndice B

B.1 Método das Frações Contínuas (MCF)

Neste apêndice descremos o método que usado para determinar as grandezas envolvidas no processo de espalhamento entre um elétron do contínuo e o alvo (átomos artificiais). A equação de Lippmann-Schwinger para um dado potencial de interação V é igual a

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle + G^{(0)}V|\psi\rangle \quad (\text{B.1.1})$$

onde $|\psi\rangle$ é a função de onda do elétron espalhado, $|\varphi\rangle$ é a função de onda da partícula livre e $G^{(0)}$ é o operador de Green de partícula livre.

O MCF consiste no cálculo da matriz \mathbf{K} de espalhamento, a qual está diretamente relacionada com as grandezas que descrevem o espalhamento através da matriz $\mathbf{T} = \mathbf{K}/(1 + i\mathbf{K})$. A matriz \mathbf{K} é definida por

$$\mathbf{K} = \langle\varphi|V|\psi\rangle \quad (\text{B.1.2})$$

Assumindo que a aproximação de Born para a matriz \mathbf{K} seja diferente de zero, ou seja, $\langle\varphi|V|\varphi\rangle \neq 0$, podemos definir o seguinte potencial $U^{(1)}$ como sendo igual a

$$U^{(1)} = V - \frac{|V|\varphi\rangle\langle\varphi|V}{\langle\varphi|V|\varphi\rangle} \quad (\text{B.1.3})$$

O operador $U^{(1)}$ definido desta maneira é ortogonal a $|\varphi\rangle$, o que significa que $U^{(1)}|\varphi\rangle = \langle\varphi|U^{(1)} = 0$. Substituindo a Eq. (B.1.3) na equação (B.1.1) obtemos

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle + (1 - G^{(0)}U^{(1)})^{-1}G^{(0)}U|\varphi\rangle \frac{\langle\varphi|U|\psi\rangle}{\langle\varphi|U|\varphi\rangle} \quad (\text{B.1.4})$$

Agora definimos duas novas funções, $|\varphi_1\rangle$ e $|\psi_1\rangle$, como sendo iguais a

$$|\varphi_1\rangle = G^{(0)}V|\varphi\rangle \quad (\text{B.1.5})$$

$$|\psi_1\rangle = (1 - G^{(0)}U^{(1)})^{-1}|\varphi_1\rangle \quad (\text{B.1.6})$$

Em termos das funções acima podemos reescrever Eq. (B.1.4) da seguinte maneira

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle + |\psi_1\rangle \frac{\langle\varphi|V|\psi\rangle}{\langle\varphi|V|\varphi\rangle} \quad (\text{B.1.7})$$

Multiplicando a Eq. (B.1.7) em ambos lados por $\langle\varphi|V$, obtemos após algumas álgebras

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle + |\psi_1\rangle \frac{\langle\varphi|V|\varphi\rangle}{\langle\varphi|V|\varphi\rangle - \langle\varphi|V|\psi_1\rangle} \quad (\text{B.1.8})$$

Substituindo a equação acima na Eq. (B.1.2) obtemos

$$K = \frac{\langle\varphi|V|\varphi\rangle^2}{\langle\varphi|V|\varphi\rangle - \langle\varphi|V|\psi_1\rangle} \quad (\text{B.1.9})$$

Desta forma termina o primeiro passo.

Para realizarmos o próximo passo devemos reescrever a Eq. (B.1.6) e o procedimento daí em diante é similar ao primeiro passo. A Eq. (B.1.6) satisfaz a seguinte equação de Lippmann-Schwinger

$$|\psi_1\rangle = |\varphi_1\rangle + G^{(0)}U^{(1)}|\psi_1\rangle \quad (\text{B.1.10})$$

Desta forma devemos seguir exatamente o mesmo procedimento desenvolvido no primeiro passo. Então analogamente podemos definir $U^{(2)}$, $|\varphi_2\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ por

$$U^{(2)} = U^{(1)} - \frac{|U^{(1)}|\varphi_1\rangle\langle\varphi_1|U^{(1)}|}{\langle\varphi_1|U^{(1)}|\varphi_1\rangle} \quad (\text{B.1.11})$$

$$|\varphi_2\rangle = G^{(0)}U^{(1)}|\varphi_1\rangle \quad (\text{B.1.12})$$

$$|\psi_2\rangle = (1 - G^{(0)}U^{(2)})^{-1}|\varphi_2\rangle \quad (\text{B.1.13})$$

Por construção o potencial $U^{(2)}$ é ortogonal a $|\varphi\rangle$ e $|\varphi_1\rangle$,

$$U^{(2)}|\varphi\rangle = U^{(2)}|\varphi_1\rangle = 0 \quad (\text{B.1.14})$$

$$U^{(2)}\langle\varphi| = U^{(2)}\langle\varphi_1| = 0 \quad (\text{B.1.15})$$

Usando o mesmo procedimento anterior nós obtemos as seguintes equações:

$$|\psi_1\rangle = |\varphi_1\rangle + |\psi_2\rangle \frac{\langle\varphi_1|U^{(1)}|\varphi_1\rangle}{\langle\varphi_1|U^{(1)}|\varphi_1\rangle - \langle\varphi_1|U^{(1)}|\psi_2\rangle} \quad (\text{B.1.16})$$

$$|\psi_2\rangle = |\varphi_2\rangle + G^{(0)}U^{(2)}|\psi_2\rangle \quad (\text{B.1.17})$$

Depois de repetirmos este procedimento N vezes, nós teremos

$$\begin{aligned} |\psi_N\rangle &= |\varphi_N\rangle + |\psi_{N+1}\rangle \frac{\langle \varphi_N | U^{(N)} | \varphi_N \rangle}{\langle \varphi_N | U^{(N)} | \varphi_N \rangle - \langle \varphi_N | U^{(N)} | \psi_{N+1} \rangle} \\ |\varphi_{N+1}\rangle &= G^{(0)} U^{(N)} |\varphi_N\rangle \\ |\psi_{N+1}\rangle &= |\varphi_{N+1}\rangle + G^{(0)} U^{(N+1)} |\psi_{N+1}\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.1.18})$$

O operador $U^{(N+1)}$ é ortogonal a $|\varphi\rangle, |\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_{N-1}\rangle$,

$$U^{(N+1)} |\varphi_i\rangle = \langle \varphi_i | U^{(N+1)} = 0 \quad (\text{B.1.19})$$

$$\text{para } i = 0, 1, \dots, N - 1. \quad (\text{B.1.20})$$

Entretanto, para cada interação o operador $U^{(N)}$ se torna cada vez mais fraco, por isso podemos finalizar o processo após M passos. Negligenciando o termo $G^{(0)} U^{(M)} |\psi_M\rangle$, teremos que

$$|\psi_M\rangle \cong |\varphi_M\rangle \quad (\text{B.1.21})$$

Usando-se as equações (B.1.18) podemos reconstruir a função $|\psi\rangle$. Na prática é mais fácil o cálculo das amplitudes de espalhamento do que a função de onda. Através da Eq. (B.1.20) obtemos as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_N | U^{(N)} | \varphi_{N+2} \rangle &= \langle \varphi_{N+1} | U^{(N+1)} | \varphi_{N+1} \rangle \\ \langle \varphi_N | U^{(N)} | \varphi_{N+M} \rangle &= 0 \quad \text{para } M = 3, 4, \dots \end{aligned} \quad (\text{B.1.22})$$

Aqui,

$$|\varphi_0\rangle = |\varphi\rangle, U^{(0)} = V$$

Agora podemos definir a amplitude parcial K_i ($i = 1, 2, \dots$) por

$$K_i = \langle \varphi_{i-1} | U^{(i-1)} | \psi_i \rangle \quad (\text{B.1.23})$$

Usando-se as Eqs. (B.1.18) e (B.1.22) podemos expressar K_i em forma de frações contínuas:

$$K_i = \langle \varphi_{i-1} | U^{(i-1)} | \varphi_i \rangle + \frac{\langle \varphi_{i-1} | U^{(i-1)} | \varphi_i \rangle^2}{\langle \varphi_{i-1} | U^{(i-1)} | \varphi_i \rangle - K_{i+1}} \quad (\text{B.1.24})$$

A amplitude K_1 está relacionada com a amplitude de espalhamento K pela seguinte relação

$$K = K_B + K_1 \frac{K_B}{K_B - K_1}, \quad K_B = \langle \varphi | U | \varphi \rangle \quad (\text{B.1.25})$$

A função de onda espalhada $|\psi\rangle$ pode ser obtida através de K_1 da seguinte maneira:

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle + |\psi_1\rangle \frac{K_B}{K_B - K_1} \quad (\text{B.1.26})$$

No caso do espalhamento multi-canal, onde há N_c canais acoplados a equação de espalhamento Eq. (3.25) pode ser reescrita em uma forma matricial

$$\tilde{\Psi} = \tilde{\varphi} + \tilde{G}^{(0)} \tilde{V} \tilde{\Psi} \quad (\text{B.1.27})$$

onde

$$\tilde{\Psi} = \begin{pmatrix} \psi_{11} & \psi_{12} & \cdots \\ \psi_{21} & \psi_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{B.1.28})$$

$$\tilde{\varphi} = \begin{pmatrix} \varphi_{11} & 0 & \cdots \\ 0 & \varphi_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{B.1.29})$$

$$\tilde{G}^{(0)} = \begin{pmatrix} G^{(0)}(k_1) & 0 & \cdots \\ 0 & G^{(0)}(k_2) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{B.1.30})$$

$$\tilde{V} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots \\ V_{21} & V_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{B.1.31})$$

Numericamente a equação matricial Eq. (B.1.27) pode ser resolvida através do MCF descrito acima.

Apêndice C

C.1 Espalhamento por três canais

Neste apêndice nós descrevemos em detalhes como é o espalhamento por três canais, onde o primeiro nível de energia possui degenerescência igual a 2, ou seja, $\epsilon_2 = \epsilon_3$. O Hamiltoniano total para este sistema é dado por:

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = H_{QD}(\mathbf{r}_1) + H_{QD}(\mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (\text{C.1.1})$$

onde H_{QD} é o hamiltoniano do QD e $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ designa o potencial de interação entre os dois elétrons (Coulomb).

Primeiramente vamos considerar o elétron confinado no estado fundamental de energia ϵ_1 . Quando o elétron incide sobre este sistema ele pode ser espalhado elasticamente ou pode excitar o elétron confinado para um estado excitado ϵ_2 e ser espalhado inelasticamente. Desta maneira a função de onda total deste sistema de dois elétrons pode ser escrita como:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi_1(\mathbf{r}_1)\psi_{11}(\mathbf{r}_2) + \varphi_2(\mathbf{r}_1)\psi_{21}(\mathbf{r}_2) + \varphi_3(\mathbf{r}_1)\psi_{31}(\mathbf{r}_2) \quad (\text{C.1.2})$$

onde o primeiro índice de ψ_{m1} se refere ao espalhamento do canal (1) para um possível canal de saída ($m = 1, 2$, ou 3) e

$$H_{QD}\varphi_m(\mathbf{r}) = \epsilon_m\varphi_m(\mathbf{r}) \quad ; m = 1, 2, 3 \quad (\text{C.1.3})$$

onde $\epsilon_2 = \epsilon_3$. Quando incluímos o espalhamento dependente de spin temos que antissimetrizar a função de onda total, de forma que

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & \varphi_1(\mathbf{r}_1)\psi_{11}(\mathbf{r}_2) + \varphi_2(\mathbf{r}_1)\psi_{21}(\mathbf{r}_2) + \varphi_3(\mathbf{r}_1)\psi_{31}(\mathbf{r}_2) \\ & \pm (\varphi_1(\mathbf{r}_2)\psi_{11}(\mathbf{r}_1) + \varphi_2(\mathbf{r}_2)\psi_{21}(\mathbf{r}_1) + \varphi_3(\mathbf{r}_2)\psi_{31}(\mathbf{r}_1)) \end{aligned}$$

onde o sinal positivo (negativo) designa o estado de spin singleto (triplete). Para podermos determinar o potencial para o elétron espalhado temos que calcular a seguinte equação:

$$\langle \varphi_m(\mathbf{r}_1) | H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle = E \langle \varphi_m(\mathbf{r}_1) | \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (\text{C.1.4})$$

onde

$$E = \epsilon_1 + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*} = \epsilon_2 + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m^*} = \epsilon_3 + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m^*} \quad (\text{C.1.5})$$

O lado esquerdo da Eq.(C.1.4) pode ser escrito como:

$$\langle \varphi_m | H | \Psi \rangle = \langle \varphi_m | H_{QD}^1 | \Psi \rangle + \langle \varphi_m | H_{QD}^2 | \Psi \rangle + \langle \varphi_m | V^{1,2} | \Psi \rangle \quad (\text{C.1.6})$$

onde o índice super-escrito denota de qual elétron é o potencial. O primeiro termo da Eq.(C.1.6) é igual a:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m | H_{QD}^1 | \Psi \rangle &= \epsilon_m \langle \varphi_m | \Psi \rangle = \epsilon_m [\langle \varphi_m | \varphi_1 \rangle \psi_{11} + \langle \varphi_m | \varphi_2 \rangle \psi_{21} \\ &+ \langle \varphi_m | \varphi_3 \rangle \psi_{31} \pm (\langle \varphi_m | \psi_{11} \rangle \varphi_1 + \langle \varphi_m | \psi_{21} \rangle \varphi_2 \\ &+ \langle \varphi_m | \psi_{31} \rangle \varphi_3] \end{aligned} \quad (\text{C.1.7})$$

O segundo termo da Eq.(C.1.6) é igual a:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m | H_{QD}^2 | \Psi \rangle &= \\ &= \langle \varphi_m | \varphi_1 \rangle H_{QD}^2 \psi_{11} + \langle \varphi_m | \varphi_2 \rangle H_{QD}^2 \psi_{21} + \langle \varphi_m | \varphi_3 \rangle H_{QD}^2 \psi_{31} \\ &\pm (\epsilon_1 \langle \varphi_m | \varphi_1 \rangle \psi_{11} + \epsilon_2 \langle \varphi_m | \varphi_2 \rangle \psi_{21} + \epsilon_3 \langle \varphi_m | \varphi_3 \rangle \psi_{31}) \end{aligned} \quad (\text{C.1.8})$$

E o terceiro termo da Eq.(C.1.6) é igual a:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m | V^{1,2} | \Psi \rangle &= \langle \varphi_m | V^{1,2} | \varphi_1 \rangle \psi_{11} + \\ &+ \langle \varphi_m | V^{1,2} | \varphi_2 \rangle \psi_{21} + \langle \varphi_m | V^{1,2} | \varphi_3 \rangle \psi_{31} \pm (\langle \varphi_m | V^{1,2} | \psi_{11} \rangle \varphi_1 + \\ &+ \langle \varphi_m | V^{1,2} | \psi_{21} \rangle \varphi_2 + \langle \varphi_m | V^{1,2} | \psi_{31} \rangle \varphi_3) \end{aligned} \quad (\text{C.1.9})$$

Substituindo-se as Eqs.(C.1.7,C.1.8 e C.1.9) na Eq.(C.1.6) e tomando-se $m = 1$

obtemos :

$$\begin{aligned}
& (H_{QD}^2 - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*})\psi_{11} + \langle \varphi_1 | V^{1,2} | \varphi_1 \rangle \psi_{11} + \langle \varphi_1 | V^{1,2} | \varphi_2 \rangle \psi_{21} + \\
& + \langle \varphi_1 | V^{1,2} | \varphi_3 \rangle \psi_{31} \pm [\langle \varphi_1 | V^{1,2} | \psi_{11} \rangle \varphi_1 + \langle \varphi_1 | V^{1,2} | \psi_{21} \rangle \varphi_2 + \\
& + \langle \varphi_1 | V^{1,2} | \psi_{31} \rangle \varphi_3 + (\epsilon_1 - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*}) \langle \varphi_1 | \psi_{11} \rangle \varphi_1 + \\
& + (\epsilon_2 - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*}) \langle \varphi_1 | \psi_{21} \rangle \varphi_2 + (\epsilon_3 - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m^*}) \langle \varphi_1 | \psi_{31} \rangle \varphi_3] = 0 \quad (C.1.10)
\end{aligned}$$

para $m = 2$ temos:

$$\begin{aligned}
& (H_{QD}^2 - \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m^*})\psi_{21} + \langle \varphi_2 | V^{1,2} | \varphi_1 \rangle \psi_{11} + \langle \varphi_2 | V^{1,2} | \varphi_2 \rangle \psi_{21} + \\
& + \langle \varphi_2 | V^{1,2} | \varphi_3 \rangle \psi_{31} \pm [\langle \varphi_2 | V^{1,2} | \psi_{11} \rangle \varphi_1 + \langle \varphi_2 | V^{1,2} | \psi_{21} \rangle \varphi_2 + \\
& + \langle \varphi_2 | V^{1,2} | \psi_{31} \rangle \varphi_3 + (\epsilon_1 - \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m^*}) \langle \varphi_2 | \psi_{11} \rangle \varphi_1 + \\
& + (\epsilon_2 - \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m^*}) \langle \varphi_2 | \psi_{21} \rangle \varphi_2 + (\epsilon_3 - \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m^*}) \langle \varphi_2 | \psi_{31} \rangle \varphi_3] = 0 \quad (C.1.11)
\end{aligned}$$

e para $m = 3$ temos:

$$\begin{aligned}
& (H_{QD}^2 - \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m^*})\psi_{31} + \langle \varphi_3 | V^{1,2} | \varphi_1 \rangle \psi_{11} + \langle \varphi_3 | V^{1,2} | \varphi_2 \rangle \psi_{21} + \\
& + \langle \varphi_3 | V^{1,2} | \varphi_3 \rangle \psi_{31} \pm [\langle \varphi_3 | V^{1,2} | \psi_{11} \rangle \varphi_1 + \langle \varphi_3 | V^{1,2} | \psi_{21} \rangle \varphi_2 + \\
& + \langle \varphi_3 | V^{1,2} | \psi_{31} \rangle \varphi_3 + (\epsilon_1 - \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m^*}) \langle \varphi_3 | \psi_{11} \rangle \varphi_1 + \\
& + (\epsilon_2 - \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m^*}) \langle \varphi_3 | \psi_{21} \rangle \varphi_2 + (\epsilon_3 - \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m^*}) \langle \varphi_3 | \psi_{31} \rangle \varphi_3] = 0 \quad (C.1.12)
\end{aligned}$$

Agora existem duas outras situações possíveis que temos que considerar: o elétron confinado ocupa um estado excitado ϵ_2 com momentum angular $l = 1$ ($l = -1$) e um elétron que incide neste sistema pode ser espalhado elasticamente ou pode desexcitar o elétron confinado para um estado de mais baixa energia ϵ_1 e ser espalhado inelasticamente. Desta maneira a função de onda total deste sistema de dois elétrons pode ser escrita como:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{m=1}^3 [\varphi_m(\mathbf{r}_1)\psi_{mi}(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_m(\mathbf{r}_2)\psi_{mi}(\mathbf{r}_1)] \quad (C.1.13)$$

onde primeiro índice de ψ_{mi} indica o espalhamento pelo canal i para ($m=1, 2, 3$). Repetindo as mesmas operações matemáticas feitas acima, podemos determinar

equações semelhantes para um canal qualquer i , ou seja,

$$\begin{aligned} & (H_{QD}^2 - \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m^*})\psi_{mi} + \sum_{n=1}^3 [\langle \varphi_m | V^{1,2} | \varphi_n \rangle \psi_{ni} \pm \\ & \pm \left(\langle \varphi_m | V^{1,2} | \psi_{ni} \rangle \varphi_n + (\epsilon_n - \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m^*}) \langle \varphi_m | \psi_{ni} \rangle \varphi_n \right)] = 0 \end{aligned} \quad (C.1.14)$$

Podemos ainda simplificar esta equação da seguinte forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}(\nabla^2 + k_m^2)\psi_{mi} + \sum_{n=1}^3 [V_{mn}^{st} + V_{mn}^{ex}] \psi_{mi} = 0 \quad (C.1.15)$$

onde

$$\begin{aligned} V_{mn}^{st} &= \langle \varphi_m | V^{1,2} | \varphi_n \rangle + V_{QD} \delta_{mn} \\ V_{mn}^{ex} \psi_{mi} &= \pm \langle \varphi_m | V^{1,2} | \psi_{ni} \rangle \varphi_n \pm (\epsilon_n - \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m^*}) \langle \varphi_m | \psi_{ni} \rangle \varphi_n \end{aligned} \quad (C.1.16)$$

É interessante notar que neste caso (um elétron confinado no QD), o potencial de troca possui uma parte devida ao potencial de Coulomb e outra devida ao sanduíche das funções de onda do contínuo e do discreto. As equações de espalhamento podem ser resolvidas através do MCF multi-canal descrito no Apêndice B.

Apêndice D

D.1 Cálculo do potencial de troca: Ondas parciais

Nesta seção deste apêndice, apresentamos como do potencial de troca que acopla dois canais (m, n) , para um único spin-orbital α , pode ser expandido em ondas parciais. O potencial de troca para este caso é dado por:

$$V_{mn}^{ex}(\mathbf{r})\psi_{ni}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon_0^*}\zeta_\alpha^n(\mathbf{r}) \int \zeta_\alpha^{m*}(\mathbf{r}_1) \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|} \psi_{ni}(\mathbf{r}_1) d^2\mathbf{r}_1$$

Como dito anteriormente, devemos expandir as funções em ondas parciais, ou seja,

$$\psi_{ni}(\mathbf{r}) = \sum_{l,l'} \psi_{ni}^{l,l'}(k, r) \Theta_l(\phi_r) \Theta_{l'}(\phi_k) \quad (\text{D.1.1})$$

$$\zeta_\alpha^n(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \zeta_{n\alpha}^l(r) \Theta_l(\phi_r) \quad (\text{D.1.2})$$

$$V_{mn}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} V_{mn}^l(r) \Theta_l(\phi_r) \quad (\text{D.1.3})$$

O produto de duas funções expandidas em ondas parciais também pode ser expandido na base do momentum angular,

$$\psi_{ni}(\mathbf{r})\zeta_\alpha^m(\mathbf{r}) = \sum_{l,l'} \Pi_{ni;m\alpha}^{l,l'}(k, r) \Theta_l(\phi_r) \Theta_{l'}(\phi_k) \quad (\text{D.1.4})$$

onde

$$\Pi_{ni;m\alpha}^{l,l'}(k, r) = \sum_{\lambda,\lambda'} \frac{\psi_{ni}^{\lambda,l'} \zeta_{n\alpha}^{\lambda'}(r)}{2\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\epsilon_\lambda \epsilon_{\lambda'}}{\epsilon_l}} (\delta_{l,\lambda+\lambda'} + \delta_{l,|\lambda-\lambda'|}) \quad (\text{D.1.5})$$

$$V_{mn}^{ex}(\mathbf{r})\psi_{ni}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon_0^*}\zeta_\alpha^n(\mathbf{r}) \sum_{l,l'} \Theta_{l'}(\phi_k) \int_0^\infty r_1 dr_1 \Pi_{ni;m\alpha}^{l,l'}(k, r) \times \int_0^{2\pi} d\phi_{r_1} \Theta_l(\phi_{r_1}) \times \frac{1}{\sqrt{r^2 + r_1^2 - 2rr_1 \cos(\phi_r - \phi_{r_1})}} \quad (\text{D.1.6})$$

Fazendo a seguinte mudança de variável $\theta = \phi_r - \phi_{r_1}$, obtemos:

$$V_{mn}^{ex}(\mathbf{r})\psi_{ni}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon_0^*}\zeta_\alpha^n(\mathbf{r}) \sum_{l,l'} \Theta_{l'}(\phi_k) \int_0^\infty r_1 dr_1 \Pi_{ni;m\alpha}^{l,l'}(k, r) \times \int_{0-\theta}^{2\pi-\theta} d\theta \Theta_l(\phi_r - \theta) \times \frac{1}{\sqrt{r^2 + r_1^2 - 2rr_1 \cos(\theta)}} \quad (\text{D.1.7})$$

Devido as propriedades de simetria do cosseno a Eq. (D.1.7) pode ser reescrita como:

$$V_{mn}^{ex}(\mathbf{r})\psi_{ni}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon_0^*}\zeta_\alpha^n(\mathbf{r}) \sum_{l,l'} \Theta_l(\phi_r)\Theta_{l'}(\phi_k) \int_0^\infty r_1 dr_1 \Pi_{ni;m\alpha}^{l,l'}(k, r) \times \int_0^{2\pi} d\theta \Theta_l(\theta) \times \frac{1}{\sqrt{r^2 + r_1^2 - 2rr_1 \cos(\theta)}} \quad (\text{D.1.8})$$

Para resolver a integral angular nós utilizamos a função geratriz dos polinômios de Legendre [36]:

$$\frac{1}{\sqrt{r^2 + r_1^2 - 2rr_1 \cos(\theta)}} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{r_{<}^j}{r_{>}^{j+1}} P_j(\cos \theta) \quad (\text{D.1.9})$$

onde $r_{<} = \min(r, r_1)$, $r_{>} = \max(r, r_1)$. Desta maneira a integral angular que sobra é igual a

$$c_{l,j} = \int_0^{2\pi} d\theta \Theta_l(\theta) P_j(\cos \theta) \quad (\text{D.1.10})$$

Substituindo-se as Eqs.(D.1.9 e D.1.10) na Eq.(D.1.8) obtemos:

$$V_{mn}^{ex}(\mathbf{r})\psi_{ni}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon_0^*}\zeta_\alpha^n(\mathbf{r}) \sum_{l,l'} \sum_{j=0}^{\infty} \Theta_l(\phi_r)\Theta_{l'}(\phi_k) \times \int_0^\infty r_1 dr_1 \Pi_{ni;m\alpha}^{l,l'}(k, r) c_{l,j} \frac{r_{<}^j}{r_{>}^{j+1}} \quad (\text{D.1.11})$$

Primeiramente calculamos os coeficientes $c_{l,j}$ da Eq.(D.1.10) e os deixamos armazenados na memória do computador. Depois a integral em r_1 é calculada numericamente em cada iteração do MCF e depois somamos até os valores de j, l, l' escolhidos para a convergência e finalmente nós multiplicamos por $-\frac{e^2}{\epsilon_0^*}\zeta_\alpha^n(\mathbf{r})$.

D.2 Cálculo do potencial de troca: Confinado

Neste apêndice mostramos quais truques foram usados para se calcular o potencial de troca para o QD confinado no caso onde existe somente um elétron no estado fundamental confinado dentro do QD. O potencial de troca é dado por:

$$V_{ex}(\vec{r}_1)\Psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}_1) = -\frac{e^2}{\epsilon_0^*}\zeta_0(\vec{r}_1) \int \zeta_0^*(\vec{r}_2) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \quad (\text{D.2.12})$$

Assumimos que a função de onda do elétron confinado seja igual ao estado fundamental da base Fock-Darwin.

$$\zeta_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{l_0\sqrt{\pi}} e^{-\frac{r^2}{2l_0^2}} \quad (\text{D.2.13})$$

onde $l_0 = \sqrt{\hbar/m^*\omega_0}$. Neste caso iremos considerar somente um modo transversal, ou seja, a função de onda é igual a

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}_1) = \chi_0(y_1)\psi_0(x_1) \quad (\text{D.2.14})$$

onde $\chi_0(y) = (l_0^2\pi)^{-1/4} \exp(-\frac{y^2}{2l_0^2})$. Substituindo-se a função de onda na Eq.(D.2.12), multiplicando-se por $\chi_0^*(y)$ e integrando-se na direção transversal obtemos:

$$\begin{aligned} V_{0,0}^{ex}(x_1)\psi(x_1) &= \frac{-e^2}{\epsilon_0^*l_0^2(\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 e^{-\frac{y_1^2}{l_0^2}} e^{-\frac{x_1^2}{2l_0^2}} \int dx_2 \times \\ &\times \int dy_2 \frac{e^{-\frac{y_2^2}{l_0^2}} e^{-\frac{x_2^2}{2l_0^2}} \psi_0(x_2)}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}} \end{aligned} \quad (\text{D.2.15})$$

Fazendo um troca de variáveis $u_1 = x_1/l_0$, $v_1 = y_1/l_0$, $u_2 = x_2/l_0$ e $v_2 = y_2/l_0$ na equação acima, obtém-se:

$$V_{0,0}^{ex}(u_1)\psi(u_1) = \frac{-e^2}{\epsilon_0^*} \frac{e^{-\frac{u_1^2}{2}}}{(\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dv_1 e^{-v_1^2} \int du_2 \int dv_2 \frac{e^{-v_2^2} e^{-\frac{u_2^2}{2}} \psi_0(u_2)}{\sqrt{(u_1 - u_2)^2 + (v_1 - v_2)^2}}$$

Para resolver esta integral nós usamos o seguinte truque:

$$\frac{1}{\sqrt{(u_1 - u_2)^2 + (v_1 - v_2)^2}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dz e^{-z^2[(u_1 - u_2)^2 + (v_1 - v_2)^2]} \quad (\text{D.2.16})$$

e desta maneira obtemos:

$$\begin{aligned} V_{0,0}^{ex}(u_1)\psi(u_1) &= \frac{-2e^2}{\epsilon_0^*\pi^2} e^{-\frac{u_1^2}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} du_2 \int_{-\infty}^{\infty} dv_1 \int_{-\infty}^{\infty} dv_2 e^{-\frac{u_2^2}{2}} \psi_0(u_2) \times \\ &\times \int_0^{\infty} dz e^{-v_1^2 - v_2^2} e^{-z^2[(u_1 - u_2)^2 + (v_1 - v_2)^2]} \end{aligned} \quad (\text{D.2.17})$$

Primeiramente resolvemos a integral sobre v_2 .

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dv_2 e^{-v_2^2} e^{-z^2[v_2^2 - 2v_1v_2]} = \frac{\sqrt{\pi} e^{z^4 v_1^2 / (1+z^2)}}{\sqrt{1+z^2}} \quad (\text{D.2.18})$$

A próxima integral que podemos resolver analiticamente é a integral sobre v_1 :

$$I_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{1+z^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dv_1 e^{-v_1^2} e^{-z^2 v_1^2} e^{z^4 v_1^2 / (1+z^2)} = \frac{\pi}{\sqrt{1+2z^2}} \quad (\text{D.2.19})$$

A integral sobre a variável z é igual a:

$$I_3 = \pi \int_0^{\infty} dz \frac{e^{-z^2[(u_1-u_2)^2]}}{\sqrt{1+2z^2}} \quad (\text{D.2.20})$$

Fazendo a seguinte mudança de variável $w = 2z^2$ podemos resolver a integral sobre z analiticamente.

$$I_3 = \frac{\pi\sqrt{2}}{4} \int_0^{\infty} dw \frac{e^{-\frac{w(u_1-u_2)^2}{2}}}{\sqrt{w}\sqrt{1+w}} = \frac{\sqrt{2}}{4} e^{\frac{(u_1-u_2)^2}{4}} K_0\left(\frac{(u_1-u_2)^2}{4}\right) \quad (\text{D.2.21})$$

onde $K_0(x)$ é a função de Hankel de ordem zero [36]. Finalmente obtemos uma expressão para o potencial de troca, a qual pode ser facilmente implementada no computador.

$$V_{0,0}^{ex}(u_1)\psi(u_1) = \frac{-e^2\sqrt{2}}{2\pi\epsilon_0^*} e^{-\frac{u_1^2}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} du_2 e^{-\frac{u_2^2}{2}} e^{\frac{(u_1-u_2)^2}{4}} K_0\left(\frac{(u_1-u_2)^2}{4}\right) \psi_0(u_2)$$