



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA  
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA  
**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**Influência da Deslocação Parafuso no Coeficiente de  
Absorção Ótico e na Frequência de Absorção Limiar**

**Gilson Aciole Rodrigues**

CAMPINA GRANDE

- Setembro 2016 -

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA  
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**Influência da Deslocação Parafuso no Coeficiente de  
Absorção Ótico e na Frequência de Absorção Limiar**

**Gilson Aciole Rodrigues**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Campina Grande, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Física.

Área de Concentração: Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Cleverson Filgueiras

CAMPINA GRANDE

- Setembro 2016 -

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

- R696i      Rodrigues, Gilson Aciole.  
              Influência da deslocação parafuso no coeficiente de absorção ótico e na  
              frequência de absorção limiar / Gilson Aciole Rodrigues. – Campina  
              Grande, 2016.  
              43 f. : il. color.
- Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Campina  
              Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2016.  
              "Orientação: Prof. Dr. Cleverson Filgueiras".  
              Referências.
1. Efeito Aharonov-Bohm. 2. Coeficiente de Absorção. 3.  
              Deslocamento Parafuso. 4. Frequência de Absorção. I. Filgueiras,  
              Cleverson. II. Título.

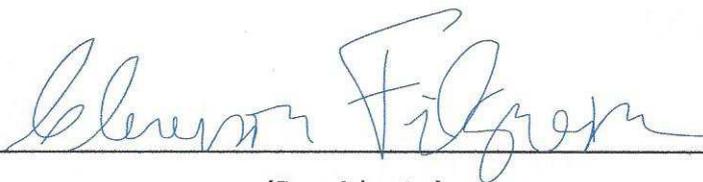
CDU 530.145(043)

**GILSON ACIOLE RODRIGUES**

**INFLUÊNCIA DA DESLOCAÇÃO PARAFUSO NO COEFICIENTE DE ABSORÇÃO  
ÓTICO E NA FREQUÊNCIA DE ABSORÇÃO LIMIAR**

Dissertação aprovada em 28/09/2016

**BANCA EXAMINADORA**



(Presidente)

Prof. Dr. Cleverton Figueiras  
Unidade Acadêmica de Física – UFCG



(Membro interno)

Prof. Dr. Danievertton Moretti  
Unidade Acadêmica de Física – UFCG



(Membro externo)

Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva  
Departamento de Física – UFLA

*”...Ele conta o número das estrelas, a cada uma dá um nome. Nosso Senhor é Soberano e mui poderoso; é infinita sua sabedoria...”*

Salmos 147

# Agradecimentos

AO MEU DEUS, que é o motivo de todas as minhas conquistas, aquele que é o Rei dos Reis e amigo Fiel, o meu pilar forte e seguro nos momentos de aflições. Portanto, toda Honra, Glória e Louvor a Ele.

A minha Esposa Maria Rocha que é uma companheira em todas as batalhas, pelo apoio e contribuição neste trabalho e meus filhos Maria Giovanna e Luiz Felipe, que ao longo desta jornada me motivaram a subir mais um degrau, amo vocês.

Aos meus pais, Joel Rodrigues e Maria Aparecida que são exemplos para mim. Agradeço porque eles nunca pouparam esforços para me oferecer a oportunidade de estudar e alcançar mais esta vitória. Aos meus irmãos, Sidney Aciole e Lidiany Aciole que nunca deixaram de me incentivar, pelo carinho e conselhos em todos os momentos.

Ao Meu Orientador, Dr. Cleverson Filgueiras, pela atenção, compreensão e incentivo ao longo de todo o trabalho.

Aos professores do departamento de Física da UFCG, em especial, Diego Cogollo, Eduardo Passos, Danieverton Moretti, Lincoln Rodrigues, Francisco Brito que contribuíram ao longo da minha formação, não só por meio das disciplinas e debates, mas, pelos momentos de amizade e compreensão. Não esquecendo os demais professores do departamento de Física.

Aos Colegas, em especial, Rosinildo Fidelis, Mayara Lima, Anderson Alves, Edme Vale, Fabiano Santos, Ervelane Mariano, Deusalete Vilar e os demais pelos momentos de amizade e apoio.

Agradeço à CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) pela concessão da bolsa durante todo o período de realização deste Mestrado.

Enfim, agradeço a todos que contribuíram de forma direta e indireta.

*Aos meus pais, esposa e filhos.*

# Lista de Figuras

2.1	Defeitos pontuais: (a) lacuna e (b) auto-intersticial ou intersticial, na rede de um metal sólido compacto . . . . .	4
2.2	(a) Deslocação cunha (aresta) positiva, numa rede cristalina.(b)Deslocação cunha (aresta) com indicação da orientação do vetor de Burgers. . . . .	5
2.3	Cristal bidimensional em uma rede quadrada mostrando o campo vetorial dos deslocamentos em relação a sua posição de equilíbrio . . . . .	5
2.4	Espaço do parâmetro de ordem dos deslocamentos atômicos em uma rede quadrada. . . . .	6
2.5	Etapas da geração de uma desclinação positiva através do processo de Volterra	7
2.6	a) uma deslocação lateral e b) uma deslocação parafuso . . . . .	8
3.1	Descrição esquemática da densidade de estados para um semiconductor com a variação de sua estrutura da dimensão 3 para a dimensão 0. [35] . . . . .	14
3.2	Uma secção transversal através de uma pastilha que consiste em camadas de GaAs e AlGaAs. . . . .	15
3.3	Ponto quântico real mostrado na direita e esquematicamente na esquerda. Os elétrons são confinados verticalmente na interface da heteroestrutura de GaAs-AlGaAs formando um gás de elétrons bidimensional (área escura). O confinamento lateral é feito aplicando-se uma voltagem negativa. O ponto quântico é acoplado a dois contatos por dois guias [41]. . . . .	16
3.4	Um arranjo experimental proposto por Aharonov Bohm para gerar padrão de interferência [52]. . . . .	18
3.5	a) Franjas de interferência do feixe de elétrons, diferença de fase gerado pelo vetor potencial sobre os elétrons. b e c) Imagem do pequeno toroide [52]	18
4.1	Parte cilíndrica de um sólido 3D que mostra o deslocamento parafuso. . . .	24

4.2	Variação da frequência de absorção limiar $\varpi_{00}$ (em unidade de $\varepsilon_g$ ) em função de $B$ para vários valores do parâmetro $r$ . Em (a), exibimos $\varpi_{00}$ para a ausência de um fluxo $\delta = 0$ e em (b), exibimos $\varpi_{00}$ para $\delta = 1$ . . . . .	33
4.3	As variações das frequências de absorção limiar $\varpi_{00}$ (em unidade de $\varepsilon_g$ ) em função de $\rho_0$ para diferentes valores do parâmetro $r$ . Em (a), exibimos $\varpi_{00}$ para $\delta = 0$ e em (b), exibimos $\varpi_{00}$ para $\delta = 1$ . . . . .	35
4.4	A frequência de absorção limiar $\varpi_{00}$ para o anti ponto quântico em função de $B$ para vários valores do parâmetro $r$ . Em (a), exibimos $\varpi_{00}$ para a ausência do fluxo, $\delta = 0$ (b), exibimos $\varpi_{00}$ para $\delta = 1$ . . . . .	36

# Sumário

Agradecimentos	v
Lista de Figuras	viii
Resumo	xi
Abstract	xii
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Defeitos topológicos</b>	<b>4</b>
2.1 Cristais Topologicamente Distorcidos . . . . .	8
2.2 Níveis de Landau na presença de uma dispiração . . . . .	9
<b>3 Pontos Quânticos</b>	<b>13</b>
3.1 Pontos quânticos, anti pontos quânticos e fios quânticos . . . . .	13
3.2 Efeito Aharonov-Bohm . . . . .	17
3.3 Ponto quântico e Anti ponto quântico em Campo Externo . . . . .	20
<b>4 Influência da deslocação parafuso no coeficiente de absorção ótico e na frequência de absorção limiar</b>	<b>23</b>
4.1 A equação de Schrodinger para um elétron em torno de um deslocamento parafuso . . . . .	24
4.2 Influência do deslocamento parafuso sobre os níveis de energia . . . . .	26
4.3 Coeficiente de absorção de luz e a frequência limiar na presença do defeito deslocação parafuso . . . . .	30
<b>5 Conclusão e perspectiva</b>	<b>37</b>



# Resumo

A influência dos deslocamentos parafuso em sistemas quânticos tem recebido considerável atenção nos últimos anos. Alguns trabalhos são baseados na teoria geométrica de defeitos em semicondutores e desenvolvidos por Katanaev Volovich. Nesta abordagem, o semicondutor com um deslocamento parafuso é descrito por uma variedade de Riemann-Cartan onde o deslocamento parafuso está associado ao vetor Burgers. Neste limite do contínuo, um deslocamento parafuso afeta um sistema quântico como um tubo de fluxo magnético isolado, causando fenômenos de interferência tipo Aharonov-Bohm (AB). O espectro de energia de elétrons em torno deste tipo de defeito mostra uma configuração semelhante a do sistema AB. Neste trabalho, investigamos a influência de um deslocamento parafuso sobre os níveis de energia e as funções de onda de um elétron confinado em um potencial pseudo-harmônico bidimensional (2D) sob a influência de um campo magnético externo para o ponto quântico e campo Aharonov-Bohm para um pseudo-ponto quântico. As soluções exatas para autovalores de energia e funções de onda são computadas em função do campo magnético uniforme, fluxo Aharonov-Bohm, número quântico magnético e do parâmetro que caracteriza o deslocamento parafuso, o vetor Burgers. Foram investigadas as modificações devido à deslocação parafuso no coeficiente de absorção de luz e na frequência de absorção limiar. Descobrimos que conforme o vetor Burgers aumenta, as curvas de frequência são impulsionadas para cima em direção ao crescimento do mesmo. Um aspecto interessante que observamos é que o fluxo Aharonov-Bohm pode ser ajustado de forma a cancelar o efeito do deslocamento parafuso.

Palavras-chave: Efeito Aharonov-Bohm - Coeficiente de Absorção - Deslocamento Parafuso - Frequência de Absorção.

# Abstract

The influence of screw dislocations in quantum systems has received considerable attention in recent years. Some works are based on the geometric theory of defects in semiconductors and developed by Katanaev Volovich. In this approach the semiconductor with a screw dislocation is described by a variety of Riemann-Cartan where the screw dislocation is associated with the Burgers vector. This limit of the continuum, a screw displacement affects a quantum system as an isolated magnetic flux tube, causing phenomena of interference type Aharonov-Bohm (AB). The electron energy spectrum around this type of defect shows a configuration similar to the AB system. In this work, we investigated the influence of a screw dislocation on the energy levels and the wavefunctions of an electron confined in a two-dimensional pseudoharmonic quantum dot under the influence of an external magnetic field inside a dot and Aharonov-Bohm field inside a pseudodot. The exact solutions for energy eigenvalues and wavefunctions are computed as functions of applied uniform magnetic field strength, Aharonov-Bohm flux, magnetic quantum number and the parameter characterizing the screw dislocation, the Burgers vector. We investigate the modifications due to the screw dislocation on the light interband absorption coefficient and absorption threshold frequency. We found that as the Burgers vector increases, the curves of frequency are pushed up towards of the growth of it. One interesting aspect which we have observed is that the Aharonov-Bohm flux can be tuned in order to cancel the screw effect of the model.

Keywords: Aharonov-Bohm effect - Absorption coefficient - Screw dislocation - Absorption threshold frequency .

# Capítulo 1

## Introdução

A importante evolução na mecânica quântica em meados do século XX, seguido da possibilidade de resolução de novas equações matemáticas por intermédio de ferramentas computacionais, permitiriam a investigação detalhada dos fenômenos físicos que ocorrem na matéria condensada. O efeito dessa evolução resultou no surgimento de dispositivos eletrônicos, vários tipos de sensores e novos materiais para aplicações na indústria.

Sistemas quânticos no espaço com diversas topologias tem sido abordado em diferentes áreas da física, por exemplo, na gravitação e física da matéria condensada. No contexto dessa última, a mudança na topologia pode apresentar alguns tipos de defeitos. Portanto, tais defeitos desempenham um papel importante na determinação de propriedades físicas, químicas e estruturais de um material.

Um defeito topológico é, em geral, caracterizado por alguma região central onde a ordem é destruída, através de uma quebra de simetria [1]. A geometria de Riemann-Cartan descreve defeitos em sólidos, onde a métrica não é trivial e pode existir torção. Nessa aproximação, um cristal pode ser visto como um meio elástico contínuo.

Em cristais topologicamente distorcidos, o movimento de uma partícula quântica relaciona dois aspectos, geometria e teoria de calibre. Todavia, a dinâmica de uma partícula em uma variedade Riemann-Cartan, ou seja, uma variedade com curvatura e torção, tem atraído muito interesse em vários ramos da física: Na relatividade geral, na física do estado sólido, em teoria da gravitação [2]. Cristais sólidos e líquidos com defeitos topológicos no limite do contínuo podem também ser descritos por uma variedade de Riemann-Cartan onde agora os campos de curvatura e torção são proporcionais às densidades de carga topológicas dos defeitos [3], [4]. Por exemplo, o vetor de Burgers de um

deslocamento dá origem a uma torção e o ângulo de Frank de uma desclinação corresponde à curvatura. [5].

Lifshitz e Pushkarov identificaram um número infinito de estados ligados em uma partícula em deslocamento lateral (edge dislocation) [6]. Por argumentos semelhantes, Kosevich apontou a possível existência de estados ligados a deslocação parafuso [7]. Por outro lado, em uma abordagem puramente geométrica, Kawamura observou efeito de interferência do tipo Aharonov-Bohm no processo de espalhamento de uma partícula ao redor de uma deslocação parafuso [8].

Neste limite do contínuo, um deslocamento parafuso afeta um sistema quântico como um tubo de fluxo magnético isolado, causando um fenômeno de interferência do tipo AB [9]. O espectro de energia de elétrons em torno deste tipo de defeito mostra uma configuração semelhante a do sistema AB [10] [11] [12] [13]. Um segundo ingrediente, que pode mostrar influências pronunciadas nestes sistemas quânticos, é um potencial deformado adicional induzido por uma distorção elástica da estrutura [14]. É um potencial escalar repulsivo (não covariante). O impacto desse potencial foi primeiro investigado em [10], em que o espalhamento de elétrons em torno de um deslocamento parafuso foi investigada. Recentemente, foi demonstrado que um único deslocamento parafuso tem profunda influência no transporte eletrônico em semicondutores [15].

Neste trabalho, investigamos a influência de um deslocamento parafuso sobre os níveis de energia e as funções de onda de um elétron confinado em um potencial pseudo-harmônico bidimensional (2D) sob a influência de um campo magnético externo para ponto quântico e campo Aharonov-Bohm para um pseudo-ponto quântico. As soluções exatas para autovalores de energia e funções de onda são computadas em função do campo magnético uniforme, fluxo Aharonov-Bohm, número quântico magnético e do parâmetro que caracteriza o deslocamento parafuso, vetor Burgers. Foram investigadas as modificações devido à deslocação parafuso no coeficiente de absorção de luz e na frequência de absorção limiar. Descobrimos que conforme o vetor Burgers aumenta, as curvas de frequência são impulsionadas para cima em direção ao crescimento do mesmo. Um aspecto interessante que observamos é que o fluxo Aharonov-Bohm pode ser ajustado de forma a cancelar o efeito do deslocamento parafuso nessas quantidades físicas.

A estrutura desta dissertação é como segue.

No Capítulo 2 faremos uma breve revisão de defeitos topológicos em cristais, as

novas descobertas e a métrica deste tipo de problema. Apresentamos os níveis de Landau na presença de defeitos topológicos. No Capítulo 3, foram abordados os conceitos sobre pontos quânticos e anti pontos quânticos. Investigamos a influência de um campo magnético externo para ponto quântico e campo Aharonov-Bohm. No Capítulo 4, investigamos as modificações devido ao deslocamento do parafuso na frequência coeficiente de absorção de luz entre bandas e do limiar de absorção. Um segundo ingrediente, que vamos considerar é um potencial deformado adicional induzido por uma distorção elástica da estrutura. Por fim, no Capítulo 5, temos as observações finais.

# Capítulo 2

## Defeitos topológicos

As imperfeições nas redes cristalinas são classificadas de acordo com a sua geometria e forma. Podem envolver uma irregularidade na posição dos átomos ou no tipo de átomos. O tipo e o número de defeitos dependem do material, do meio ambiente, e das circunstâncias sob as quais o cristal é processado. É possível classificar alguns tipos defeitos, como: Defeito pontuais, representado pela figura 2.1, que apresentam irregularidades em alguns átomos, podendo ser lacunas.

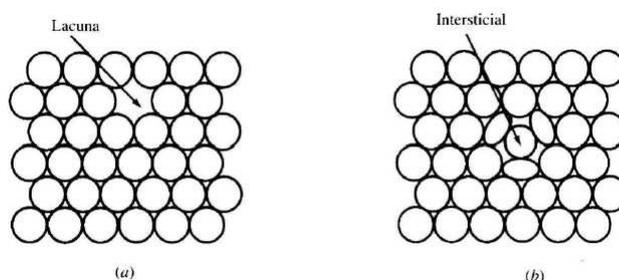


Figura 2.1: Defeitos pontuais: (a) lacuna e (b) auto-intersticial ou intersticial, na rede de um metal sólido compacto

Defeitos lineares, representado pela figura 2.2, que ocorrem em uma única fileira de átomos, podendo ser em hélice ou tipo cunha.

Nos sólidos cristalinos, os defeitos lineares ou deslocações são defeitos que originam uma distorção da rede centrada em torno de uma linha. Desta forma, os defeitos afetam propriedades físicas e mecânicas, tais como plasticidade, ponto de fusão, a condutividade eletrônica dos semicondutores (condutividade dos semicondutores depende das impurezas presentes), dentre outras. Portanto, são influenciadas pela presença de deslocamento ou

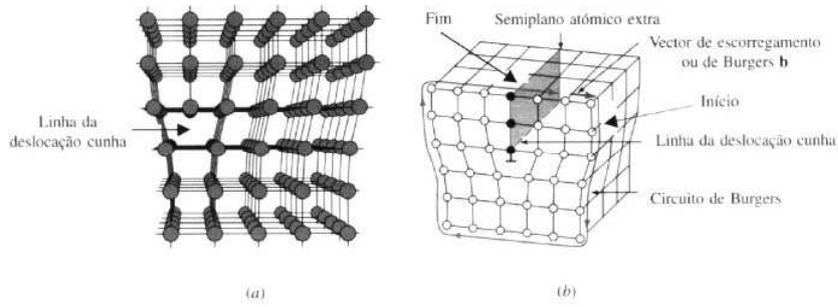


Figura 2.2: (a) Deslocação cunha (aresta) positiva, numa rede cristalina.(b)Deslocação cunha (aresta) com indicação da orientação do vetor de Burgers.

desclinações.

Em um cristal, pode haver uma quebra na simetria, modificada pelo arranjo periódico de sua célula unitária. Em um caso mais simples, um cristal bidimensional tem a configuração de mais baixa energia inserido em uma rede quadrada. Portanto, considerando uma quebra dessa simetria devido um pequeno deslocamento dos seus átomos em relação a sua posição de equilíbrio. Esse deslocamento pode ser caracterizado por  $\vec{u}(\vec{r})$

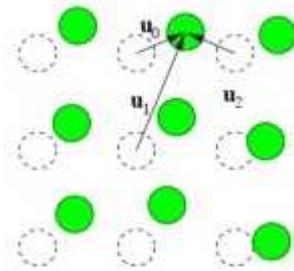


Figura 2.3: Cristal bidimensional em uma rede quadrada mostrando o campo vetorial dos deslocamentos em relação a sua posição de equilíbrio

O parâmetro de ordem  $\vec{u}(\vec{r})$  não é exatamente um vetor. Como podemos ver na figura 2.3, há sempre uma ambiguidade em relação a qual átomo ideal (da rede não perturbada) estamos nos referindo para o deslocamento. O vetor de deslocamento  $\vec{u}$  muda por um múltiplo da constante de rede sempre que mudamos o átomo de referência:

$$\vec{u} \equiv \vec{u} + a \equiv \vec{u} + ma\hat{x} + na\hat{y} \quad (2.1)$$

O conjunto de parâmetros de ordem diferentes formam um quadrado com condições

periódicas de contorno ver figura 2.4, o qual possui a mesma topologia que um torus  $\tau^2$

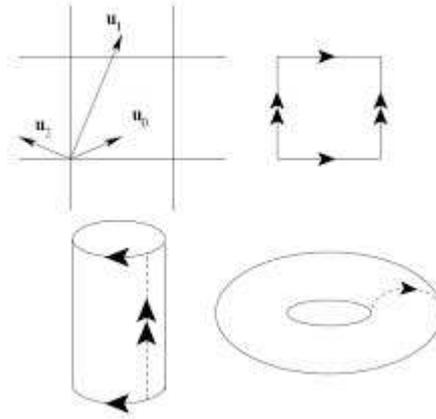


Figura 2.4: Espaço do parâmetro de ordem dos deslocamentos atômicos em uma rede quadrada.

A discussão acima mostra alguns exemplos de parâmetro de ordem e nos ajuda a entendermos o conceito. Também exemplificamos como podemos apresentar o espaço do parâmetro de ordem (também conhecido por variedade dos estados internos - manifold of internal states) de diferentes formas. Em particular, enfatizamos a apresentação do parâmetro de ordem na forma de parâmetro de ordem topológico. Essa representação facilita a discussão posterior, em particular na questão de defeitos.

Muitos estudos experimentais e teóricos sobre defeitos em cristais começaram em 1930 e continua hoje em dia. Todavia, mesmo após vários trabalhos publicados sobre esse assunto, ainda não há uma teoria fundamental sobre defeitos. Diversas teorias descrevem meios elásticos contendo defeitos, a teoria geométrica de defeitos descreve o sólido elástico com alguns parâmetros utilizados na geometria de Riemann-Cartan [11], [16], [17], nesse contexto, um cristal pode ser visto como um meio elástico contínuo. A influência desses defeitos nas quantidades físicas de um elétron pode ser compreendida através da abordagem geométrica, assim, podemos usar uma métrica adequada que incorpore as condições de contorno impostas pelo defeito.

Um trabalho publicado em 1992 por Katanaev e Volovich [18] marcou a abordagem via teoria geral de defeitos. Neste é feito uma aproximação da teoria de defeitos em sólidos com a gravitação na qual os defeitos são incorporados à métrica que descreve o meio. Desta forma, surge uma alternativa ao modelo representado pela teoria da elasticidade, na qual a descrição de defeitos em sólidos usa equações relativamente complicadas se comparadas

a teoria geral de defeitos.

Na Matéria Condensada, os defeitos topológicos surgem nos cristais. Sabe-se que se um cristal passa de uma fase para outra, por exemplo, da fase líquida para a sólida, sua estrutura muda, entretanto algumas regiões no cristal tendem a manter-se na organização da fase anterior. Esses trechos do material sem simetria geram um defeito na sua estrutura [1]. Entre esses defeitos, em nosso trabalho abordamos um tipo de defeito linear, que podem ser as desclinações e as deslocções [19].

Uma maneira de representar geometricamente a formação de defeitos lineares é através do chamado processo de Volterra [20]. Este procedimento consiste de um mecanismo de "corte" e "cola" em que, para gerar o defeito, podem ocorrer uma ou mais das seguintes etapas: inserção ou retirada de material do meio, deslocamentos ou encurvamentos do material.

Como um exemplo, quando é retirada uma fatia do material, para  $\alpha < 1$ , temos desclinações positivas; quando é adicionado material, sendo  $\alpha > 1$ , temos desclinações negativas. Na Figura 2.5 é representada a visualização do processo de Volterra para geração de uma desclinação do tipo cunha, que é um exemplo de desclinação positiva. Inicialmente, temos um plano, do qual é retirada uma fatia de ângulo diedral  $\lambda^2$  e em seguida as extremidades são identificadas, gerando um cone.

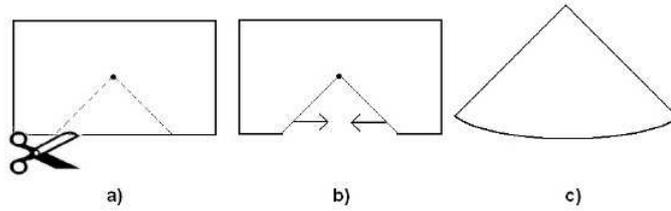


Figura 2.5: Etapas da geração de uma desclinação positiva através do processo de Volterra

A métrica para uma desclinação, em coordenadas cilíndricas, tem a forma

$$ds^2 = d\rho^2 + \alpha^2 \rho^2 d\varphi^2 + dz^2, \quad (2.2)$$

em que  $\rho > 0, 0 < \varphi < 2\pi, -\infty < z < \infty$ . Todavia, o ângulo diedral  $\lambda$  e o parâmetro  $\alpha$  na métrica acima relaciona-se [21] via expressão  $\lambda = 2\pi(\alpha - 1)$ . Além disso,  $\lambda$  pode ser associado ao vetor axial  $\vec{\lambda}$ , que está orientado ao longo do eixo  $z$  para uma desclinação em cunha. Este vetor axial é o chamado vetor de Frank

Outro tipo de defeito linear é a deslocação. Podemos destacar dois tipos, a deslocação lateral (edge dislocation) e a deslocação parafuso (screw dislocation). A visualização desses dois tipos de defeitos está representada na figura 2.6. Nela aparece um vetor representado pela letra  $b$ , que dá a intensidade do deslocamento relativo dos planos separados para gerar a deslocação. Este vetor é denominado vetor de Burgers.

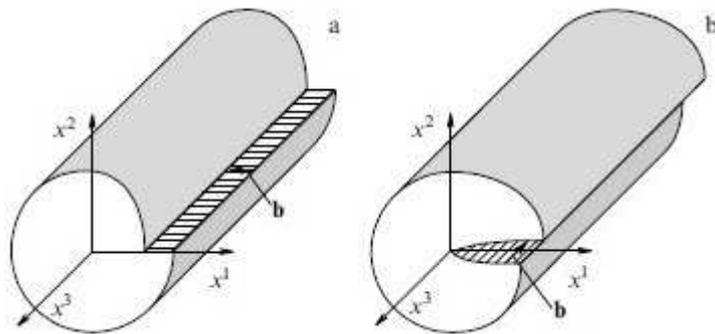


Figura 2.6: a) uma deslocação lateral e b) uma deslocação parafuso

A métrica para uma deslocação, tipo parafuso ao longo do eixo  $z$  é dada por

$$ds^2 = d\rho^2 + (dz + \beta d\varphi)^2 + \rho^2 d\varphi^2, \quad (2.3)$$

em que  $\rho > 0, 0 < \varphi < 2\pi, -\infty < z < \infty$ .

No caso da métrica que aparece na equação 2.3, o vetor de Burgers tem apenas a componente  $b^z$  não nula. Portanto a relação do parâmetro  $\beta$  com a intensidade do vetor de Burgers ocorre através de  $b^z = 2\pi\beta$

## 2.1 Cristais Topologicamente Distorcidos

Deslocamentos e desclinações em um cristal modificam as simetrias da estrutura cristalina ideal e, conseqüentemente, viola o teorema Bloch para estados quânticos eletrônicos. Fora da região central de tais defeitos topológicos a rede parece, localmente perfeita. Todavia, integralmente ela é distorcida em distâncias arbitrárias a partir do núcleo do defeito. Portanto, defeitos topológicos afetam predominantemente o comprimento de onda de estados quânticos de um elétron.

Na deformação potencial [22] a abordagem desta distorção do comprimento de onda é tratada como uma perturbação na malha ideal. No entanto, é inadequado. Por exemplo, no processo de espalhamento de elétrons em deslocamento parafuso, onde devido

à distorção topológica global, um elétron não pode ser descrito por uma onda plana simples [8]. Por outro lado, na abordagem puramente geométrica, perdemos efeitos interessantes, como o aparecimento de estados ligados para deslocação lateral [6].

No movimento de uma partícula quântica em cristais topologicamente distorcidos, foram analisados dois aspectos recentemente. O primeiro relaciona campo de Gauge à teoria de defeitos topológicos [23] [24] [25]. O segundo usa uma linguagem da geometria diferencial à teoria contínua de defeitos [26] [27] [28], e tem sido aplicado aos casos de deslocações laterais e parafuso [10].

Primeiro estabelecemos uma aproximação tight-binding para um elétron em movimento em uma estrutura topologicamente distorcida. Como um ingrediente adicional, as transferências de energias dependem das deformações elásticas proveniente dos defeitos. Através de uma imagem microscópica, os elétrons espalhados pelo cristal se mostram sensíveis a deformações locais. Na descrição contínua, este efeito dá origem a termos não covariantes adicionais no Hamiltoniano, que são descritos por potenciais devidos a deformações elásticas no cristal.

## 2.2 Níveis de Landau na presença de uma dispiração

Nesta seção vamos mostrar um exemplo de como os defeitos afetam um sistema quântico no limite do contínuo. Vamos analisar os níveis de Landau na presença de uma dispiração. Este defeito corresponde à curvatura singular e torção ao longo da linha de defeitos [18]. A partir da teoria clássica da elasticidade, o vetor de Burgers pode ser visto como fluxo de torção e vetor de Frank como um fluxo de curvatura. Este defeito é descrito pela seguinte métrica:

$$ds^2 = (dz + \beta d\phi)^2 + d\rho^2 + \alpha^2 \rho^2 d\phi^2, \quad (2.4)$$

em que  $\beta = \frac{b}{2\pi}$  e  $\alpha = \left(1 - \frac{\lambda}{2\pi}\right)$ . Esta métrica é equivalente à seguinte construção: remoção ( $\alpha < 1$ ) ou inserção ( $\alpha > 1$ ) de uma cunha de material de ângulo diedral  $\lambda = 2\pi(1 - \alpha)$ , de acordo com o processo Volterra [29], junto com uma delocação parafuso,  $b$  sendo o vetor de Burgers.

Para determinar os níveis de Landau vamos considerar a equação de Schrödinger covariante

$$\frac{1}{2m} \nabla^2 \Psi = i \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (2.5)$$

o operador Laplaciano é

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_i (g^{ij} \sqrt{g} \partial_j), \quad (2.6)$$

e  $g = \det |g_{ij}|$  representa o determinante da métrica  $g_{ij}$ .

Portanto, a equação de Schrödinger escrita no espaço dotado por essa métrica incorpora as condições de contorno descrita pelo defeito. Os níveis de Landau, na presença de uma dispiração, pode ser determinado. A expressão do potencial vetor,  $\vec{A}$ , que dá um campo magnético uniforme nesta métrica é dada pela

$$A(\rho) = \frac{B\rho}{2\alpha}, \quad (2.7)$$

Esta expressão é muito semelhante ao caso euclidiano. A partir do acoplamento mínimo  $p_i \rightarrow p_i - \frac{e}{c} \vec{A}$ , podemos escrever o hamiltoniano para uma quase-partícula de massa efetiva  $m$ , na presença de uma distribuição de dispiração submetidos a um campo magnético uniforme na direcção  $z$ , que é dada pela

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \partial_z^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho (\rho \partial_\rho) + \frac{1}{\alpha^2 \rho^2} (\partial_\phi - \beta \partial_z)^2 \right\} + \frac{iqB\hbar}{2mc\alpha} (\partial_\phi - \beta \partial_z)^2 + \frac{q^2 B^2 \rho^2}{8mc^2 \alpha^2}. \quad (2.8)$$

A equação de Schrödinger correspondente a este caso pode ser resolvida, considerando-se o seguinte ansatz

$$\Psi(\phi, \rho, z) = C e^{il\phi} e^{ikz} R(\rho), \quad (2.9)$$

em que  $C$  é uma constante de normalização. Substituindo esta função de onda na equação de Schrödinger obtemos a seguinte equação radial

$$\frac{1}{\rho} \partial_\rho (\rho \partial_\rho R(\rho)) - \frac{1}{\rho^2 \alpha^2} (l - \beta k)^2 R(\rho) - \frac{q^2 B^2 \rho^2}{4\hbar^2 c^2 \alpha^2} R(\rho) - \frac{qB}{2\hbar c \alpha} (l - \beta k) R(\rho) - k^2 R(\rho) + \varepsilon R(\rho) = 0, \quad (2.10)$$

com  $\varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2}$ . Agora, fazendo uma mudança de variáveis  $\sigma = \frac{\rho^2}{2}$ , a equação (2.10) resulta em

$$\sigma^2 \frac{d^2 R}{d\sigma^2} + \sigma \frac{dR}{d\sigma} + \left\{ \frac{A}{2} \sigma - \frac{q^2 B^2 \sigma^2}{4\hbar^2 c^2} - \frac{(l - \beta)^2}{4} \right\} R(\sigma) = 0, \quad (2.11)$$

em que  $A = \varepsilon - k^2 - \frac{qB}{2\hbar c \alpha} (l - \beta k)$ . A solução desta equação é dada em termos de função hipergeométrica confluyente,  $F$ . Portanto,

$$R(\rho) = C \exp \left\{ -\frac{m\omega_B}{4\hbar\alpha} \rho^2 \right\} \rho^{\frac{|l-\beta k|}{\alpha}} F \left( -n, \frac{|l - \beta k|}{\alpha} + 1, \frac{m\omega_B}{2\hbar\alpha^2} \rho^2 \right), \quad (2.12)$$

em que  $\omega_B = \frac{qB_0}{mc}$ . A condição necessária para  $R(\rho)$  é ser quadrado integrável

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} R(\rho) = 0, \quad (2.13)$$

que é cumprido por  $F$  se

$$F \left( -n, \frac{|l - \beta k|}{\alpha} + 1, \frac{m\omega_B}{2\hbar\alpha^2} \rho^2 \right) \quad (2.14)$$

desta forma, os autovalores de 2.11 serão dados por

$$E = \frac{\hbar\omega_B}{\alpha} \left\{ n + \frac{|l - \beta k|}{2\alpha} - \frac{(l - \beta k)}{2\alpha} + \frac{1}{2} \right\}, \quad (2.15)$$

onde  $n = 0, 1, 2, \dots$ , e a autofunção é expressa por

$$\Psi(\rho, \phi, z) = C e^{ikz} e^{i\phi} \exp \left[ \frac{m\omega_B \rho^2}{4\hbar\alpha} \right] \rho^{\frac{|l-\beta k|}{\alpha}} F \left( -n, \frac{|l - \beta k|}{\alpha} + 1, \frac{m\omega_B}{2\hbar\alpha^2} \rho^2 \right). \quad (2.16)$$

A partir desta expressão nota-se que a presença do defeito quebra a degenerescência dos níveis de energia. A degenerescência é fortemente quebrada devido à influência de ambos os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$ . Note que, se tomarmos  $\alpha = 0$ , obtemos os resultados para um deslocamento [12] e para  $\beta = 0$ , obtemos resultados semelhantes para uma desclinação [30].

Em seguida, o parâmetro  $\nu$  é agora dada por

$$\nu = \frac{l - \beta \frac{l\pi}{d}}{\alpha}. \quad (2.17)$$

se  $\alpha = 1$ , o que significa nenhuma curvatura, recuperamos expressão [31]. Assim,  $\nu$  tem alguma influência na condutividade Hall. Note que estamos interessados nas consequências físicas devido à presença de um deslocamento parafuso em um 2DEG. A influência de  $\alpha$  foi investigada na referência [32], já em [31] mostrou-se como o efeito Hall é influenciado pela presença de ambos os defeitos, para uma desclinação e um deslocamento parafuso.

Uma vez que consideramos elétrons em semicondutores comuns, introduzimos um *potencial deformado* que descreve os efeitos da deformação na estrutura sobre propriedades eletrônicas em certo material [14]. Para um deslocamento parafuso, é

$$V_a(\rho) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{b^2}{4\pi^2\rho^2} \left[ 2 + a^2 \left( \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 \right], \quad (2.18)$$

em que  $a$  é constante da estrutura. Desta forma, o potencial deformado introduz uma mudança em 2.17. Assim, temos

$$\nu^2 = \left( \frac{l - \beta k}{\alpha} \right)^2 + \frac{2\beta^2}{a^2} \left( 1 - \frac{k^2 a^2}{2} \right) \quad (2.19)$$

# Capítulo 3

## Pontos Quânticos

Neste trabalho temos interesse nas modificações do coeficiente de absorção de luz e na frequência de absorção limiar. Pontos quânticos também podem constituir materiais capazes de absorver e emitir luz em qualquer conjunto de comprimento de onda. Portanto, neste capítulo iremos conhecer um pouco mais sobre pontos quânticos e anti pontos quânticos.

### 3.1 Pontos quânticos, anti pontos quânticos e fios quânticos

Nos últimos anos, a pesquisa em semicondutores assumiu, literalmente, novas dimensões. Elétrons podem ser confinados em superfícies planas, em fios ou em pontos quânticos. Esse avanço permitiu o desenvolvimento de ferramentas de nanofabricação, que é o caso da fabricação de microchips. A construção de nanomateriais permite construir uma estrutura quase átomo a átomo. Portanto, essa técnica abriu um novo campo da química e física fundamental pois tem sido estudado átomos artificiais, moléculas e cristais. Os pesquisadores não estão limitados pelas formas atômicas, tamanhos e distribuições de cargas disponíveis na natureza [33].

Além das novas descobertas, pontos quânticos podem gerar propriedades que podem ser aproveitadas para uma gama de aplicações eletrônicas e ópticas, como o desenvolvimento de computadores de capacidade nunca vista. Pontos quânticos também podem constituir materiais capazes de absorver e emitir luz em qualquer conjunto de comprimentos de onda ou servir de base para lasers semicondutores mais eficientes e precisos

[34].

Como fazer planos, fios e pontos quânticos em material real, tridimensional? A resposta está na mecânica quântica, o princípio da incerteza de Heisenberg nos diz que não podemos determinar com precisão (simultaneamente) a posição e o momento de uma partícula. Quando um elétron é mais estreitamente confinado, seu momento deve ser mais incerto. Esta ampla gama de momentos traduz em uma média de energia mais elevada. Se um elétron for confinado em uma camada infinitamente fina, sua energia também seria infinita. Em geral, a energia de elétrons em um semiconductor é limitada pela sua temperatura e pelas propriedades do material. Quando os elétrons estão confinados em uma camada fina o suficiente, no entanto, as exigências do princípio da incerteza em vigor substitui outras considerações.

Elétrons confinados em um plano não têm liberdade de movimento na terceira dimensão. Aqueles confinados em um fio quântico são livres em apenas uma dimensão, e aqueles confinados em um ponto quântico não são livres em qualquer dimensão.

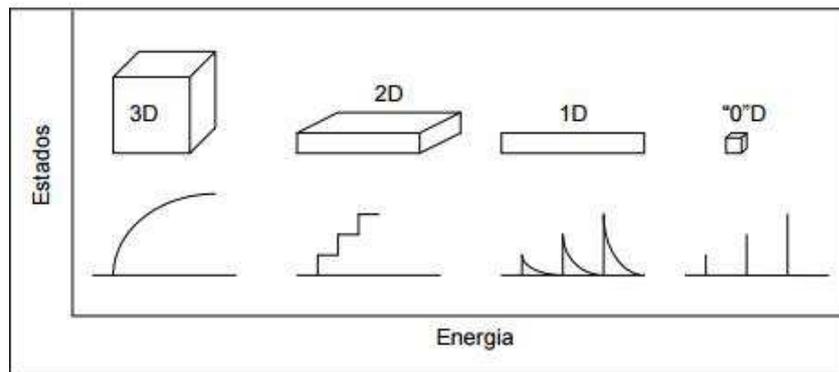


Figura 3.1: Descrição esquemática da densidade de estados para um semiconductor com a variação de sua estrutura da dimensão 3 para a dimensão 0. [35]

Os pontos quânticos são estruturas que se caracterizam pelo confinamento nas três direções espaciais para os elétrons. Desta forma é possível obter a localização do portadores, semelhante ao que acontece com os átomos [36], [37], [38], [39]. Portanto, também são conhecidos como átomos artificiais [40].

Os resultados do confinamento em nível quântico já eram conhecidos antes dos pontos quânticos. O estudo sobre confinamento era possível devido às técnicas de crescimento de heteroestruturas, que é o fato de crescer um certo material sobre um elemento ou substrato de tipos diferentes. De modo semelhante, pode ser usado uma técnica, segundo

a qual são injetados feixe de moléculas sobre o substrato, sendo possível a construção de poços quânticos e heterojunções com níveis de energia quantizados, com movimento livre de portadores no plano ortogonal a  $z$  (ou seja, no plano  $XY$ ). Esse confinamento é controlado a partir de parâmetros de crescimento da heteroestrutura. Desse modo podemos obter um gás de elétrons bidimensional (2DEG).

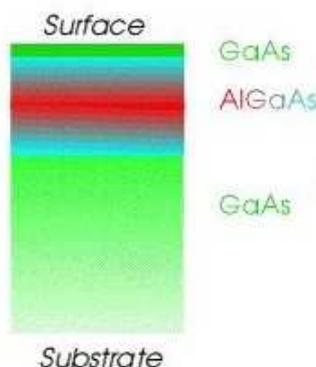


Figura 3.2: Uma secção transversal através de uma pastilha que consiste em camadas de GaAs e AlGaAs.

Um ponto quântico é uma cavidade formada em um gás de elétrons bidimensional (2DEG) (Ver figura 3.1), na região da interface de uma heteroestrutura semicondutora, aplicando-se um potencial para confinar os elétrons em uma pequena região no plano da interface (ver Figura 3.2). O tamanho de um ponto quântico é da ordem de  $1\mu m$ , que é bem menor que o comprimento de coerência de fase. Isto garante que o transporte através deste dispositivo é coerente, ou seja, a fase dos elétrons é preservada e assim surgem novos fenômenos não observados em condutores macroscópicos.

As propriedades de transporte de um ponto quântico podem ser medidas acoplando este dispositivo a guias de ondas e passando uma corrente elétrica através do ponto quântico. O acoplamento entre o ponto quântico e os guias é controlado experimentalmente, de modo que o ponto pode ser aberto ou fechado. Em pontos quânticos abertos o acoplamento é forte e os elétrons atravessam a junção ponto-guia sem sofrer tunelamento. Mas em pontos quânticos fechados são formadas barreiras e a condutância ocorre apenas por tunelamento. Neste último caso a carga do ponto quântico é quantizada e os níveis de

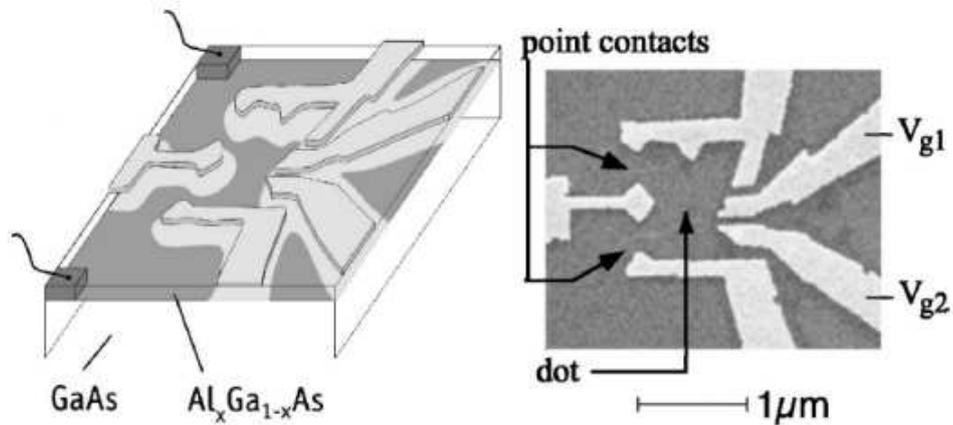


Figura 3.3: Ponto quântico real mostrado na direita e esquematicamente na esquerda. Os elétrons são confinados verticalmente na interface da heteroestrutura de GaAs-AlGaAs formando um gás de elétrons bidimensional (área escura). O confinamento lateral é feito aplicando-se uma voltagem negativa. O ponto quântico é acoplado a dois contatos por dois guias [41].

energia são discretos [42]. Devido ao espectro de energia discreto, uma aplicação simples dessa propriedade física seria a construção de laser e fotodetectores, devido às transições entre os níveis que ocorrem para energias bem definidas [43], [36].

Encontramos na literatura que a definição da cor em pontos quânticos depende mais das suas dimensões que do material de que é feito. Desta forma, quanto maior sua dimensão, tem-se uma coloração mais para o vermelho do espectro; quanto menor, tem-se uma coloração mais para o azul do espectro que tende a fluorescência<sup>1</sup>. Exemplo de aplicações dessa tecnologia em nosso cotidiano são tocadores de DVD, que utilizam um laser azul para leitura de dados.

Um anti ponto quântico pode ser obtido a partir da sobreposição de fortes espalhadores em um gás de elétrons bidimensional, normalmente perfurando buracos em um intervalo regular em um gás de elétrons com alta mobilidade. O perfil do potencial para um anti ponto quântico é semelhante ao de um ponto quântico visto de forma invertida: enquanto o potencial do ponto quântico é uma função convexa, o do anti ponto quântico é uma função côncava. Ou ainda, podemos ver o anti ponto quântico como um exemplo de barreira de potencial bidimensional.

<sup>1</sup>A fluorescência é o processo de emissão de um fóton na passagem espontânea de um estado eletrônico de energia mais alta para um estado de energia mais baixa

Fios quânticos, nanofios ou anéis quânticos são estruturas que têm uma dimensão lateral confinada e uma dimensão longitudinal livre com dimensões envolvidas que são da ordem de nanômetros. Dentre os diversos tipos de materiais com que os nanofios podem ser feitos temos os semicondutores (InP, GaAs). Alguns efeitos podem surgir no uso dos nanofios. Na sua superfície, átomos não se ligam aos átomos vizinhos, conhecido como efeito de borda. Desta forma, torna-se um obstáculo à condução. Anéis metálicos nessas dimensões em um campo magnético externo revelam vários fenômenos físicos como: o efeito Aharonov-Bohm, o efeito Hall quântico, correntes persistentes e etc [44], [45]. Muitos modelos teóricos levam em consideração anéis de dimensões finitas [46], [47] tais como: anéis 2D com potencial confinante tipo paredes duras [48] ou potenciais parabólicos [49].

No estudo sobre fios quânticos, destacamos o efeito Aharonov-Bohm que consiste em um fenômeno quântico onde uma partícula carregada interage com um campo eletromagnético, até mesmo quando ela passa por pontos em que o campo é nulo. Associado ao campo magnético blindado, temos um fluxo que é denominado na literatura por *fluxo Aharonov-Bohm*  $\phi_{AB}$ . Tal interação é percebida a partir de um potencial vetor  $\vec{A}$ , que agora mostra um significado físico [50].

Uma discussão um pouco mais detalhada sobre o efeito Aharonov-Bohm é dada na seção a seguir.

## 3.2 Efeito Aharonov-Bohm

Em 1959, Aharonov e Bohm [9] comprovaram a influência do potencial vetor no comportamento quântico de uma partícula carregada. Na mecânica quântica, os potenciais passam a ter um significado físico, como foi comprovado no experimento de Aharonov-Bohm. O potencial vetor é inserido na hamiltoniana de Schrodinger por meio de um acoplamento mínimo  $\vec{P} = \vec{p} - e \vec{A}$  da seguinte forma:

$$H = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2. \quad (3.1)$$

Classicamente, tinha sido provado, através da expressão da força de Lorentz que não poderia existir influências eletromagnéticas nas regiões em que  $E$  e  $B$  fossem zero

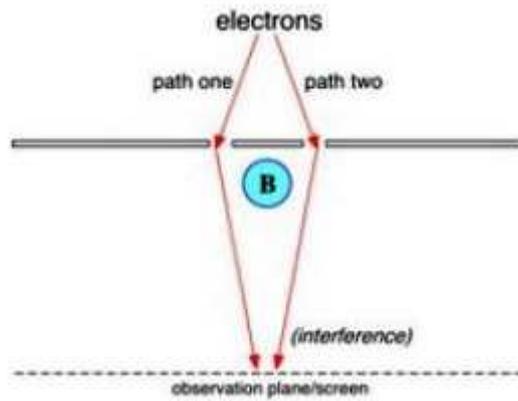


Figura 3.4: Um arranjo experimental proposto por Aharonov Bohm para gerar padrão de interferência [52].

[51]. Contudo, Aharonov e Bohm mostraram que o potencial vetor pode afetar o comportamento quântico de uma partícula carregada até mesmo quando ela está passando por pontos em que o campo é zero. Considere um feixe de partículas carregadas movendo-se em direção a um solenoide. O feixe se divide em dois ao passar por um obstáculo (como ilustrado na figura 3.4) e se recombina em uma certa região do espaço (depois de ter passado pelas vizinhanças do solenoide), gerando um padrão de interferência. O solenoide é extremamente longo e circula uma corrente  $I$ .

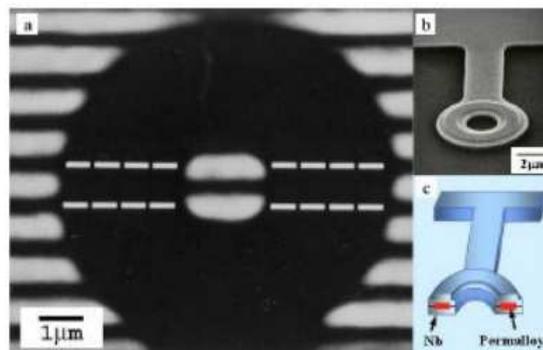


Figura 3.5: a) Franjas de interferência do feixe de elétrons, diferença de fase gerado pelo vetor potencial sobre os elétrons. b e c) Imagem do pequeno toroide [52]

Em 1985, um experimento realizado por Akira Tonomura verificou o efeito Aharonov Bohm, onde uma fonte de elétrons ao longo de caminhos diferentes passavam por um pequeno toroide revestido com uma película supercondutora, de pequenas dimensões que tem aproximadamente  $10\mu m$  figura 3.5. Quando os elétrons passam através do toroide as

franjas de interferência são geradas devido a luz que passa através do pequeno toroide, apresentando a diferença de fase que é gerada na partícula carregada pelo potencial vetor nas regiões onde o campo é nulo.

No experimento é possível obter uma diferença de fase muito pequena, no entanto, foi demonstrado o efeito Aharonov Bohm.

Nessas condições haverá um campo magnético interno  $B$  constante e um campo externo nulo. Todavia, o potencial vetor não será zero fora do solenoide, ele é dado (em coordenadas polares) pelas seguintes expressões

$$A_\phi = \frac{B}{2}r, \quad r < a \quad A_\phi = \frac{BR^2}{2r} = \frac{\Phi}{2\pi r}, \quad r > a \quad (3.2)$$

onde  $\Phi = \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$  é o fluxo magnético através do solenoide.

Considere a região onde o campo magnético é nulo, a equação de Schrodinger que depende do tempo é dada por:

$$\left[ \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2 + V \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (3.3)$$

Após algumas manipulações algébricas, encontramos o fator de fase magnética

$$\phi = \frac{e}{\hbar} \int_{r_0}^r \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \quad (3.4)$$

Na presença de um campo magnético, a solução da equação de Schrodinger pode ser obtida multiplicando  $\psi_0$  pelo fator de fase magnética. Voltando ao experimento de Aharonov-Bohm, os feixes de elétrons que eram divididos em dois ao passarem próximo a um solenoide longo, se recombinam novamente com fases diferentes,

$$\phi = \pm \frac{e\Phi}{2\hbar} \quad (3.5)$$

onde o sinal positivo corresponde ao fato de os elétrons se moverem na mesma direção do potencial  $\mathbf{A}$  e o sinal de menos no caso contrário.

A diferença de fase, que é proporcional ao fluxo de campo magnético, é dada por

$$\Delta\Phi = \frac{e\Phi}{\hbar} = \frac{e}{\hbar} \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}. \quad (3.6)$$

### 3.3 Ponto quântico e Anti ponto quântico em Campo Externo

Considere um único elétron,  $e$ , com carga em um sistema 2D, com uma massa efetiva,  $\mu$ , confinado em uma simetria radial um ponto quântico (elétrons) e anti ponto quântico (buraco) com potencial sujeito a um campo magnético uniforme,  $\mathbf{B} = B\hat{z}$  e um fluxo de campo AB, a equação de Schrodinger com interação do potencial e o campo, resulta [53]

$$\left[ \frac{1}{2\mu} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V_{conf}(r) \right] \Psi(r, \phi) = E\Psi(r, \phi), \quad (3.7)$$

em que  $E$  são os autovalores de energia,  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  é o momento,  $V_{conf}(r)$  é uma interação escalar pseudoharmônica definida como [54], [58].

$$V_{conf}(r) = V_0 \left( \frac{r}{r_0} - \frac{r_0}{r} \right)^2, \quad (3.8)$$

em que  $r_0$  e  $V_0$  são o ponto zero (raio efetivo) e o potencial químico. Neste caso, o vetor potencial  $\mathbf{A}$ , pode ser representado com uma soma de dois termos:  $\vec{A} = \vec{A}_1 + \vec{A}_2$

$$\mathbf{A} = \left( \frac{Br}{2} + \frac{\Phi_{AB}}{2\pi r} \right) \hat{\phi}, \quad (3.9)$$

onde  $\mathbf{B} = B\hat{z}$  é o campo magnético aplicado e  $\vec{A}_2$  descreve a fluxo magnético adicional  $\phi_{AB}$  criado por um solenoide inserido no anti ponto quântico (pseudodot). Tomando a função  $\Psi(\vec{r}, \phi)$  em coordenada cilíndricas, temos

$$\Psi(r, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\phi}} e^{im\phi} g(r), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3.10)$$

sendo  $m$  o numero quântico magnético. Inserindo a função de onda (3.10), para a equação de Schrödinger (3.7), resulta em

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g(r)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial g(r)}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[ - \left( m^2 + \frac{2m\Phi_{AB}}{\Phi_0} + \frac{\Phi_{AB}^2}{\Phi_0^2} + \frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2} \right) \right] g(r) \\ + \left[ - \left( \frac{2mV_0}{\hbar^2 r_0^2} + \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2 c^2} \right) r^2 \right] g(r) \\ + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E + 2V_0) - \frac{eBmr}{\hbar c} - \frac{e^2 B \Phi_{AB}}{2\pi \hbar^2 c^2} \right] g(r) = 0, \end{aligned} \quad (3.11)$$

com

$$\nu^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + 2V_0) - \frac{\mu\omega_c}{\hbar} (m + \xi), \quad (3.12)$$

$$\beta^2 = (m + \xi)^2 + a^2, \quad (3.13)$$

$$\gamma^2 = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 r_0^2} + \left(\frac{\mu\omega_c}{2\hbar}\right)^2. \quad (3.14)$$

Portanto, a Eq.(3.11), resulta em

$$g''(r) + \frac{1}{r}g'(r) + \frac{1}{r^2}(-\gamma^2 r^4 + \nu^2 r^2 - \beta^2)g(r) = 0, \quad (3.15)$$

em que  $\xi = \frac{\Phi_{AB}}{\Phi_0}$  é tomado como um número inteiro com a razão do fluxo  $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$ ,  $\omega_c = \frac{eB}{\mu c}$  é a frequência ciclotron e  $a = \kappa_F r_0$  com  $\kappa_F = \sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}$  é o vetor de onda de Fermi do elétron. O número quântico magnético  $m$  relaciona-se ao número quântico  $|\beta|$  (3.13). Além disso, a função de onda radial  $g(r)$  tem que satisfazer os comportamentos assintóticos, que são  $g(0) \rightarrow 0$  e  $g(\infty) \rightarrow 0$ .

A solução geral para Eq. (3.15) pode ser obtidas a partir do método de Frobenius de expansão em séries, cujo resultado é

$$g(r) = \frac{C_1 M(\lambda, \alpha, z) + C_2 W(\lambda, \alpha, z)}{r}. \quad (3.16)$$

Aqui, as funções Whittaker são definidas em termo das funções Kummer e Hipergeometrica da seguinte forma:

$$M(\lambda, \alpha, z) = e^{-\frac{1}{2}z} z^{\frac{1}{2}+\alpha} \text{hipergeometrica} \left( \frac{1}{2} + \alpha - \lambda, 1 + 2\alpha, z \right), \quad (3.17)$$

$$W(\lambda, \alpha, z) = e^{-\frac{1}{2}z} z^{\frac{1}{2}+\alpha} \text{Kummer} U \left( \frac{1}{2} + \alpha - \lambda, 1 + 2\alpha, z \right), \quad (3.18)$$

com

$$\lambda = \frac{1\nu^2}{4\gamma}, \quad (3.19)$$

$$\alpha = \frac{1\beta}{2}, \quad (3.20)$$

$$z = \gamma r^2. \quad (3.21)$$

De acordo com a condição polinomial das funções hipergeométricas, as soluções correspondentes a eq 3.16 só serão normalizadas se  $g \rightarrow 0$  quando  $r \rightarrow \pm\infty$ . Isto só é admitido quando

$$-n = \frac{1}{2} + \alpha - \lambda. \quad (3.22)$$

Portanto, a Eq. (3.22), resulta

$$\nu^2 = 2(2n + 1 + \beta)\gamma. \quad (3.23)$$

A substituição das equações (3.12) e (3.14) na equação (3.23) fornece os níveis de energia na presença de um potencial pseudo-harmônico.

$$E(\xi, \beta) = \hbar\Omega \left( n + \frac{|\beta| + 1}{2} \right) + \frac{1}{2}\hbar\omega_c(m + \xi) - 2V_0, \quad (3.24)$$

onde  $|\beta|$  é definido por (3.13) e  $\omega_D = \sqrt{\frac{2V_0}{\mu r_0^2}}$ . Temos dois conjuntos de números quânticos  $(n, m, \beta)$  e  $(n', m', \beta')$  relativos para o elétron e o buraco, respectivamente. Portanto, a fórmula do espectro de energia (3.24) para os níveis de energia do elétron - buraco é idêntica a [56] e, normalmente, utilizada para estudar as propriedades termodinâmicas de estruturas quânticas com ponto quânticos e anti ponto quânticos na presença e na ausência de campo magnético.

Consideramos alguns casos especiais de nossos resultados: 1. Ignorar o último termo,  $-2V_0$ , a fórmula anterior passa a ser a Ref.[57] os níveis de energia, o potencial na presença de ponto quânticos e anti ponto quânticos; 2. Quando  $\xi = 0$ , sendo  $\Phi_{AB} = 0$ , encontramos os níveis de energia Landau. Resulta em  $E_{nm} = \hbar\omega_c \left[ n + \frac{1}{2} (|m| + m + 1) \right]$

## Capítulo 4

# Influência da deslocação parafuso no coeficiente de absorção ótico e na frequência de absorção limiar

Este capítulo é baseado no trabalho Landau quantization, Aharonov-Bohm effect and two-dimensional pseudoharmonic quantum dot around a screw dislocation da autoria de Cleverson Filgueiras, Moises Rojas, Gilson Aciole e Edilberto O. Silva, publicado no Physics Letters A **380** (2016) 3847-3853.

Neste capítulo investigamos as modificações devido ao deslocamento parafuso no coeficiente de absorção de luz entre bandas e da frequência de absorção limiar. Um segundo ingrediente que vamos considerar é um potencial deformado adicional induzido por uma distorção elástica da estrutura. O impacto desse potencial tem sido investigado na literatura [14]. Portanto, inspirado nestes trabalhos, vamos investigar como o potencial deformado devido a uma distorção da rede cristalina afeta os níveis de energia de um gás de elétrons bidimensional (2DEG) confinado sobre uma superfície cilíndrica em um semiconductor 3D. A expressão analítica para o coeficiente entre bandas de absorção de luz e a frequência de absorção limiar são encontrados em função do campo magnético aplicado e o tamanho geométrico do pseudo ponto quântico.

## 4.1 A equação de Schrodinger para um elétron em torno de um deslocamento parafuso

Nesta seção, derivamos a equação de Schrodinger para um gás de elétrons não interagentes em torno de um deslocamento parafuso. Levamos em conta a existência de um potencial deformado induzido por deformações elásticas no cristal 3D. Consideramos um deslocamento parafuso linear infinitamente longo orientado ao longo do eixo z. A geometria tridimensional do meio é caracterizado por uma torção que é identificada com a densidade superficial do vetor Burgers na teoria clássica da elasticidade. A forma da métrica deste tipo de defeito é dada (em coordenadas cilíndricas) [18]

$$ds^2 = (dz + \beta d\varphi)^2 + d\rho^2 + \rho^2 d\varphi^2. \quad (4.1)$$

Na Eq.4.1,  $(\rho, \varphi, Z) \rightarrow (\rho, \varphi + 2\pi, Z)$ . A relação do parâmetro  $\beta$  com a intensidade do vetor de Burgers ocorre através de  $\beta = b/2\pi$ . A métrica induzida descreve um meio plano, com uma singularidade na origem. O único componente não-zero do tensor de torção neste caso é dada pela 2-formas

$$T^1 = 2\pi\beta\delta^2(\rho) d\rho\wedge d\varphi, \quad (4.2)$$

com  $\delta^2(\rho)$  sendo a função delta bidimensional no espaço plano. A Figura 4.1 ilustra a formação de um deslocamento parafuso na estrutura de um cristal em 3D.

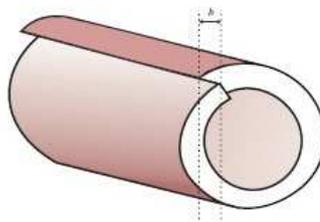


Figura 4.1: Parte cilíndrica de um sólido 3D que mostra o deslocamento parafuso.

Uma vez que consideramos elétrons em semicondutores comuns, introduzimos um *potencial deformado* que descreve os efeitos da deformação na estrutura sobre propriedades

eletrônicas em certo material [14]. Para um deslocamento parafuso, é

$$V_d(\rho) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{b^2}{4\pi^2\rho^2} \left[ 2 + a^2 \left( \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 \right], \quad (4.3)$$

em que  $a$  é constante da estrutura.

O Hamiltoniano para uma partícula carregada em um espaço curvo caracterizado pelo tensor métrico  $g_{ij}$  na presença do potencial descrito acima e na presença de campos magnéticos é dado por

$$H = \frac{1}{2m} (p_i - eA_i) g^{ij} (p_j - eA_j) + V_d(\rho), \quad (4.4)$$

em que  $g \equiv \det g_{ij}$ , com  $i, j = \rho, \varphi, z$  e  $e$  é a carga elétrica. Vamos considerar a existência de um campo magnético constante ao longo da direção- $z$ ,  $\mathbf{B}_1 = B\hat{\mathbf{z}}$ , que é obtida a partir do potencial Calibre de Landau,

$$\mathbf{A}_1 = \frac{B\rho}{2} \hat{\varphi}. \quad (4.5)$$

Considerando também no modelo, a presença do potencial AB,

$$\mathbf{A}_2 = \frac{\phi_{AB}}{2\pi\rho} \hat{\varphi}, \quad (4.6)$$

que fornece o fluxo magnético

$$\mathbf{B}_2 = \frac{\phi_{AB}}{2\pi} \frac{\delta(\rho)}{\rho} \hat{\mathbf{z}}. \quad (4.7)$$

Vamos considerar, ainda, a interação escalar pseudoharmonica. Esse potencial modela o ponto quântico, o anti ponto quântico e o anel quântico [54], [58]. Definida por

$$V_{\text{conf}} = V_0 \left( \frac{\rho}{\rho_0} - \frac{\rho_0}{\rho} \right)^2, \quad (4.8)$$

em que  $\rho_0$  e  $V_0$  são o raio efetivo e potencial químico [58]. Como pode ser visto em [15], a presença de um deslocamento parafuso pode ser descrita por um vetor potencial efetivo  $\mathbf{A}_{\text{eff}}$ , definido por

$$\mathbf{A}_{\text{eff}} \equiv \hat{\varphi} \frac{\hbar b}{2\pi\rho} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (4.9)$$

A magnitude do deslocamento parafuso,  $b$ , desempenha um papel semelhante ao  $\phi_{AB}$  no efeito AB, mas  $\mathbf{A}_{\text{eff}}$  é um operador diferencial. Dessa forma, consideramos o gás de elétrons interagindo com  $\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2 + \mathbf{A}_{\text{eff}}$ . Esse modelo é descrito pela Equação de Schrödinger

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} - \beta \frac{\partial}{\partial z} + \delta \right)^2 \right] \psi \\
& + \left[ \frac{ieB\hbar}{2m} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} - \beta \frac{\partial}{\partial z} + \delta \right) + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m} \right] \psi \\
& + V_d(\rho)\psi + V_{\text{conf}}(\rho)\psi = E\psi,
\end{aligned} \tag{4.10}$$

em que  $\delta \equiv e\phi_{AB}/2\pi\hbar$  é o parâmetro do fluxo.

Na próxima seção, vamos resolver a equação de Schrödinger acima e discutir o impacto de tal defeito topológico sobre os níveis de energia de elétrons e buracos.

## 4.2 Influência do deslocamento parafuso sobre os níveis de energia

Nesta seção, começamos a investigar a influência do deslocamento parafuso sobre os níveis de energia dos elétrons em sólidos 3D levando em conta o potencial deformado 4.3. A equação 4.10 é resolvida considerando o ansatz  $\psi \equiv \psi(\rho, \varphi, z) = C e^{il\varphi} e^{ik_z z} R(\rho)$ , em que  $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, k_z \in R$  e  $C$  é uma constante de normalização. Então,

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ -k^2 + \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho^2} \left( l - \beta k + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi\hbar} \right)^2 \right] R(\rho) + \\
& + \left[ -\frac{eB\hbar}{2m} \left( l - \beta k + \frac{e\phi_{AB}}{2\pi\hbar} \right) + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m} \right] R(\rho) + \\
& + \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{b^2}{4\pi^2 \rho^2} [2 + a^2 k^2] R(\rho) + \\
& + V_0 \left( \frac{\rho}{\rho_0} - \frac{\rho_0}{\rho} \right)^2 R(\rho) = ER(\rho).
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Esta equação diferencial pode ser reescrita como

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\nu^2}{\rho^2} - \Omega^2 \rho^2 + \epsilon \right] R(\rho) = 0 \tag{4.12}$$

em que  $\epsilon = \frac{2m}{\hbar^2} [E - k^2 + \frac{eB\hbar}{2m}(l - \beta k + \delta) + 2V_0]$ ,

$$\nu^2 = (l - \beta k + \delta)^2 + \frac{2\beta^2}{a^2} \left(1 - \frac{k^2 a^2}{2}\right) + \frac{2mV_0\rho_0^2}{\hbar^2} \quad (4.13)$$

e

$$\Omega^2 = \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2 \rho_0^2} \quad (4.14)$$

$\delta \equiv \frac{e\phi_{AB}}{2\pi\hbar}$  é o parâmetro do fluxo

A solução geral para equação de autovalor (4.12) é

$$\begin{aligned} R(\rho) = & C_1 \exp\left(-\frac{\Omega\rho^2}{2}\right) (\Omega\rho^2)^{\frac{1}{2} + \frac{|\nu|}{2}} M\left(\frac{1}{2} + \frac{|\nu|}{2} - \frac{\epsilon}{4\Omega}, 1 + |\nu|, \Omega\rho^2\right) \\ & + C_2 \exp\left(-\frac{\Omega\rho^2}{2}\right) (\Omega\rho^2)^{\frac{1}{2} + \frac{|\nu|}{2}} U\left(\frac{1}{2} + \frac{|\nu|}{2} - \frac{\epsilon}{4\Omega}, 1 + |\nu|, \Omega\rho^2\right) \end{aligned} \quad (4.15)$$

com

$$d_\nu = \frac{1}{2} + \frac{\nu}{2} - \frac{\epsilon}{4\Omega} \quad (4.16)$$

As funções  $M$  e  $U$  em 4.15 denotam as funções hipergeométricas confluentes do primeiro e segundo tipo, respectivamente. Diferentemente de  $M(a, b, z)$ , que é uma função de  $z$ ,  $U(a, b, z)$  pode mostrar uma singularidade em zero. Se o nosso sistema não apresenta singularidade, então nós podemos fazer  $C_2 \equiv 0$ . No entanto, se existe singularidade na origem, então, podemos fazer  $C_1 \equiv 0$ . Lembre-se que o nosso gás de elétrons está em uma região onde existe um defeito topológico, que pode introduzir uma singularidade em nosso problema. Primeiro vamos considerar o caso de funções de onda regulares e depois disso vamos discutir o que muda no caso irregular. Portanto, ficamos com

$$R(\rho) = C_1 \exp\left(-\frac{\Omega\rho^2}{2}\right) (\Omega\rho^2)^{\frac{1}{2} + \frac{|\nu|}{2}} M\left(\frac{1}{2} + \frac{|\nu|}{2} - \frac{\epsilon}{4\Omega}, 1 + |\nu|, \Omega\rho^2\right). \quad (4.17)$$

A condição necessária para  $R(\rho)$  é ser quadrado integrável

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} R(\rho) = 0, \quad (4.18)$$

que é cumprida por  $M$  se

$$M\left(\frac{1}{2} + \frac{|\nu|}{2} - \frac{\epsilon}{4\Omega}, 1 + |\nu|, \Omega\rho^2\right) = M(-n, 1 + |\nu|, \Omega\rho^2), \quad (4.19)$$

onde  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Desta forma, os autovalores de (Eq.4.12) serão dados por

$$E_n = 4\frac{\hbar^2}{2m}\Omega\left[n + \frac{1}{2} + \frac{|\nu|}{2}\right] - \hbar\omega_c\frac{l - \beta k + \delta}{2} - 2V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (4.20)$$

onde  $\omega_c \equiv \frac{eB}{m}$  é a frequência cíclotron. Note que

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Omega = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2\left[\frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2\rho_0^2}\right]} = \sqrt{\frac{\hbar^2\omega_c^2}{16} + \frac{\hbar^2 V_0}{2m\rho_0^2}}, \quad (4.21)$$

Para  $\delta = 0$  e  $V_0 = 0$ , temos

$$E_n \equiv E_n^{def} = \hbar\omega_c\left[n + \frac{|\nu|}{2} - \frac{l - \beta k}{2} + \frac{1}{2}\right] + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.22)$$

Note que o potencial deformado tem uma influência nos níveis de energia. Na ausência desta interação, os níveis de energia são dados por [12].

$$E_n = \hbar\omega_c\left[n + \frac{|l - \beta k|}{2} - \frac{l - \beta k}{2} + \frac{1}{2}\right] + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.23)$$

Para  $\delta = 0, V_0 = 0, \beta = 0$  e ignorando o movimento ao longo da direção-z, Temos

$$E_n = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (4.24)$$

que são os níveis de Landau para elétrons em uma amostra plana.

Neste ponto, consideramos os elétrons em uma interface plana, com uma espessura  $d$ , em torno de um deslocamento parafuso. Eles estão confinados por um poço potencial quadrado e infinito na direção  $z$  ( $0 \leq z \leq d$ ). Desta forma, temos  $k_z = \frac{l\pi}{d}$ , onde  $l = 1, 2, 3, \dots$ . Vamos considerar apenas o primeiro modo transversal  $l = 1$  existente. O parâmetro  $\nu^2$  em (Eq.4.13) pode ser escrito na seguinte maneira:

$$\nu^2 = \left(l - \frac{1ba}{2ad} + \delta\right)^2 + \frac{1}{2\pi^2}\frac{b^2}{a^2} - \frac{1b^2 a^2}{4a^2 d^2} + \frac{2mV_0\rho_0^2}{\hbar^2}. \quad (4.25)$$

Para  $\frac{b}{a} = 1$ , a (Eq.4.25) torna-se

$$\nu^2 = \left(l + \delta - \frac{a}{2d}\right)^2 + \frac{1}{2\pi^2} - \left(\frac{a}{2d}\right)^2 + \frac{2mV_0\rho_0^2}{\hbar^2}. \quad (4.26)$$

No caso onde  $\delta \equiv 0, V_0 \equiv 0$ , temos

$$\nu^2 = \left(l - \frac{a}{2d}\right)^2 + \frac{1}{2\pi^2} - \left(\frac{a}{2d}\right)^2. \quad (4.27)$$

A partir desta expressão, podemos ver como a presença de um potencial deformado tem uma influência nítida nos níveis de energia, uma vez que, na sua ausência, temos apenas

$$\nu = \left(l - \frac{a}{2d}\right). \quad (4.28)$$

Na ausência tanto do campo magnético  $B$  e do fluxo AB, encontramos

$$E_n = \hbar\sqrt{\frac{8V_0}{m\rho_0^2}} \left[ n + \frac{1}{2} + \frac{|\mu|}{2} \right] - 2V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (4.29)$$

onde

$$\mu^2 = \left(l - \frac{a}{2d}\right)^2 + \frac{1}{2\pi^2} - \frac{a^2}{4d^2} + \frac{2mV_0\rho_0^2}{\hbar^2}. \quad (4.30)$$

Na ausência do potencial deformado, temos

$$\mu^2 = \left(l - \frac{a}{2d}\right)^2 + \frac{2mV_0\rho_0^2}{\hbar^2}. \quad (4.31)$$

Vamos agora voltar nossa atenção para o caso relativo à solução irregular que é alcançado considerando  $C_1 \equiv 0$  em 4.15, ou seja,

$$R(\rho) = C_1 \exp\left(-\frac{\Omega\rho^2}{2}\right) (\Omega\rho^2)^{\frac{1}{2} + \frac{|\nu|}{2}} U\left(\frac{1}{2} + \frac{|\nu|}{2} - \frac{\epsilon}{4\Omega}, 1 + |\nu|, \Omega\rho^2\right). \quad (4.32)$$

Como mostrado em [59], esta solução diverge conforme  $\rho \rightarrow 0$ , mas é quadrado integrável quando

$$-1 < |\nu| < 1. \quad (4.33)$$

Os autovalores de 4.32 são os mesmos dados por (Eq 4.20), mas com a restrição (4.33) acima, que pode ser conseguido somente se  $l = 0$ . Em (4.20), qualquer valor de  $l$  é permitido.

### 4.3 Coeficiente de absorção de luz e a frequência limiar na presença do defeito deslocação parafuso

Nesta seção, calculamos o coeficiente de absorção de luz,  $K(\omega)$  e a frequência limiar de absorção em um pseudo ponto quântico sob a influência do campo magnético externo, fluxo campo AB e o deslocamento parafuso. O coeficiente de absorção de luz pode ser expresso como [60], [61], [62], [63],

$$K(\omega) = N \times \sum_{n,l,\nu} \sum_{n',l',\nu'} \left| \int \psi_{n,m,\nu}^e(\rho, \phi) \psi_{n',l',\nu'}^h(\rho, \phi) \rho d\rho d\phi \right|^2 \times \delta(\Delta - E_{n,m,\nu}^e - E_{n',l',\nu'}^h), \quad (4.34)$$

em que  $\Delta \equiv \hbar\omega - \varepsilon_g$ ,  $\varepsilon_g$  é a largura do gap de energia proibida,  $\omega$  é a frequência da luz incidente,  $N$  é uma grandeza proporcional ao quadrado do momento de dipolo,  $\psi^{e(h)}$  é a função de onda do elétron (buraco) e  $E^{e(h)}$  é a energia correspondente do elétron (buraco). Considerando a solução de (4.17), a Eq.(4.34) torna-se [58]

$$K(\omega) = N \sum_{n,l,\nu} \sum_{n',l',\nu'} \frac{\Omega^{|\nu|+|\nu'|+2} (n+|\nu|)! (n'+|\nu'|)!}{\pi^2 n! n'! (|\nu|!)^2 (|\nu'|!)^2} \times \left| \int_0^2 \pi e^{i(l+l')} \int_0^\infty \rho d\rho e^{-\frac{1}{2}(\Omega+\Omega')\rho^2} \rho^{|\nu|+|\nu'|} \times M(-n, 1+|\nu|, \Omega\rho^2) M(-n', 1+|\nu'|, \Omega'\rho^2) \right|^2 \times \delta(\Delta - E_{n,m,\nu}^e - E_{n',l',\nu'}^h). \quad (4.35)$$

De Ref.[58], o coeficiente de absorção da luz é dada pela equação

$$K(\omega) = N \sum_{n,l,\nu} \sum_{n',l',\nu'} P_{nn'}^\nu Q_{nn'}^\nu \delta(\Delta - E_{n,m,\nu}^e - E_{n',l',\nu'}^h), \quad (4.36)$$

em que

$$P_{nn'}^\nu = \frac{1}{(|\nu|!)^4} (\Omega\Omega')^{|\nu|+1} \left( \frac{\Omega + \Omega'}{\Omega - \Omega'} \right)^{2(n+n')} \times \frac{(n+|\nu|)! (n'+|\nu'|)!}{n! n'!},$$

e

$$Q_{nn'}^\nu = \left[ A_{|\nu|,\Omega} M\left(n, n', |\nu| + 1; -\frac{4\Omega\Omega'}{(\Omega - \Omega')^2}\right) \right]^2,$$

com

$$A_{|\nu|,\Omega} = (|\nu|)! \left( \frac{2}{\Omega + \omega'} \right)^{2|\nu|+1}.$$

A partir das Eqs. (4.20) e (4.35), a frequência de absorção será dada pela

$$\begin{aligned} \hbar\varpi &= (2n + |\nu| + 1) \left( \frac{\Omega_h}{m_h} + \frac{\Omega_e}{m_e} \right) \hbar^2 \\ &\quad - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_h} + \frac{1}{m_e} \right) (l - \beta k + \delta) \hbar e B \\ &\quad + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_h} + \frac{1}{m_e} \right) \hbar^2 k^2 + \varepsilon_g - 4V_0, \end{aligned} \quad (4.37)$$

em que  $m_e$  ( $m_h$ ) é a massa efetiva de elétron (buraco) e

$$\Omega_e = \sqrt{\frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} + \frac{2m_e V_0}{\hbar^2 \rho_0^2}}, \quad \Omega_h = \sqrt{\frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} + \frac{2m_h V_0}{\hbar^2 \rho_0^2}}.$$

Ignorando o movimento ao longo da direção- $z$  e na ausência de ambos os defeitos ( $\beta \equiv 0$ ) e do fluxo AB ( $\delta \equiv 0$ ), recuperamos a frequência de absorção encontradas em Ref. [63]. Agora que temos a frequência de absorção limiar, tendo  $(n, l) = (0, 0)$  na presença dos campos (4.5) e (4.6), encontramos

$$\begin{aligned} \hbar\varpi_{00} &= (|\nu_{l=0}| + 1) \left( \frac{\Omega_h}{m_h} + \frac{\Omega_e}{m_e} \right) \hbar^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_h} - \frac{1}{m_e} \right) (\delta - \beta k) \hbar e B \\ &\quad + \varepsilon_g + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_h} + \frac{1}{m_e} \right) \hbar^2 k^2 - 4V_0. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Na ausência de deslocamento parafuso, recuperamos as expressões de Ref. [58], ou seja

$$\begin{aligned} \hbar\varpi_{00}^{b \equiv 0} &= \left( 1 + \sqrt{\delta^2 + \frac{2m_h V_0 \rho_0^2}{\hbar^2}} \right) \frac{\Omega_h}{m_h} \hbar^2 \\ &\quad + \left( 1 + \sqrt{\delta^2 + \frac{2m_e V_0 \rho_0^2}{\hbar^2}} \right) \frac{\Omega_e}{m_e} \hbar^2 \\ &\quad + \varepsilon_g + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_h} - \frac{1}{m_e} \right) \hbar e B \delta - 4V_0. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Devido à presença do defeito, temos agora a seguinte expressão para a frequência limiar,

$$\begin{aligned} \hbar\varpi_{00}^{\text{screw}} &= \left( 1 + \sqrt{\delta^2 - \frac{\delta b}{d} + \frac{b^2}{2a^2 \pi^2} + \frac{2m_e V_0 \rho_0^2}{\hbar^2}} \right) \frac{\Omega_e}{m_e} \hbar^2 \\ &\quad + \left( 1 + \sqrt{\delta^2 - \frac{\delta b}{d} + \frac{b^2}{2a^2 \pi^2} + \frac{2m_h V_0 \rho_0^2}{\hbar^2}} \right) \frac{\Omega_h}{m_h} \hbar^2 \\ &\quad + \varepsilon_g + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_h} - \frac{1}{m_e} \right) \left( \delta - \frac{b}{2d} \right) \hbar e B - 4V_0, \end{aligned} \quad (4.40)$$

com o potencial deformado levado em consideração. Quando  $\delta \equiv 0$ , Eq.(4.40) torna-se

$$\begin{aligned}\hbar\varpi_{00}^{\text{screw}} &= \left(1 + \sqrt{\frac{b^2}{2a^2\pi^2} + \frac{2m_e V_0 \rho_0^2}{\hbar^2}}\right) \frac{\Omega_e \hbar^2}{m_e} \\ &+ \left(1 + \sqrt{\frac{b^2}{2a^2\pi^2} + \frac{2m_h V_0 \rho_0^2}{\hbar^2}}\right) \frac{\Omega_h \hbar^2}{m_h} \\ &+ \varepsilon_g - \frac{1}{4d} \left(\frac{1}{m_h} - \frac{1}{m_e}\right) \hbar e B b - 4V_0.\end{aligned}\quad (4.41)$$

Vamos agora investigar a influência do deslocamento parafuso no valor limiar para a transição de absorção  $000 \rightarrow 000$ , comparando os dois casos, um com e outro sem o potencial não covariante deformado. O argumento da função delta de Dirac permite a definição de tal valor limiar da frequência de absorção como

$$\frac{\hbar\varpi_{00}}{\varepsilon_g} = 1 + \frac{E_0^e + E_0^h}{\varepsilon_g}.$$

Vamos agora definir os seguintes parâmetros:

$$\begin{aligned}\eta &= \frac{\rho_0 \varepsilon_g}{\hbar} \sqrt{\frac{m_e}{V_0}}, \quad \eta' = \frac{\rho_0 \varepsilon_g}{\hbar} \sqrt{\frac{m_h}{V_0}}, \\ \kappa &= \frac{e\hbar B}{m_e \varepsilon_g}, \quad \kappa' = \frac{e\hbar B}{m_h \varepsilon_g}.\end{aligned}$$

Para um ponto quântico, tomamos  $V_0 \rho_0^2 \rightarrow 0$ . Neste caso, obtemos

$$\frac{E_0^e}{\varepsilon_g} = \frac{1}{2}(1 + \xi) \sqrt{\kappa^2 + \frac{8}{\eta^2}} - \frac{\kappa}{2} \left(\delta - \frac{b}{2d}\right) - \frac{2V_0}{\varepsilon_g}, \quad (4.42)$$

$$\frac{E_0^h}{\varepsilon_g} = \frac{1}{2}(1 + \xi) \sqrt{\kappa'^2 + \frac{8}{\eta'^2}} + \frac{\kappa'}{2} \left(\delta - \frac{b}{2d}\right) - \frac{2V_0}{\varepsilon_g}, \quad (4.43)$$

em que

$$\xi = \sqrt{\delta^2 - \frac{\delta b}{d} + \frac{b^2}{2a^2\pi^2}}.$$

Por outro lado, para um anti ponto quântico, tomamos o limite  $(V_0/\rho_0^2) \rightarrow 0$ . Neste caso, mantendo o potencial deformado, temos

$$\frac{E_0^e}{\varepsilon_g} = \frac{\kappa}{2} \left(\varsigma + 1 - \delta + \frac{b}{2d}\right) - \frac{2V_0}{\varepsilon_g}, \quad (4.44)$$

$$\frac{E_0^h}{\varepsilon_g} = \frac{\kappa'}{2} \left(\varsigma + 1 + \delta - \frac{b}{2d}\right) - \frac{2V_0}{\varepsilon_g}, \quad (4.45)$$

onde

$$\varsigma = \sqrt{\delta^2 - \frac{\delta b}{d} + \frac{b^2}{2a^2\pi^2} + \frac{2m_e V_0 \rho_0^2}{\hbar^2}}.$$

Agora vamos estudar o efeito do fluxo  $AB$ , na presença e ausência do vetor de Burgers, para um ponto quântico e anti ponto quântico na frequência de absorção limiar  $\varpi_{00}$  para uma estrutura típica  $2D$  de GaAs, com os seguintes parâmetros:  $V_0 = 0,68346$  meV,  $a = 5 \text{ \AA}$ ,  $d = 15 \text{ nm}$ ,  $m_e = 0,067m_0$  e  $m_h = 0,34m_0$ , onde  $m_0$  é a massa efetiva de elétrons livres.

Na 4.2, que mostra as variações das frequências de absorção limiar  $\varpi_{00}$  (em unidade de  $\frac{\varepsilon_g}{\hbar}$ ) para um ponto quântico como função do campo magnético  $B$  (em unidades de Tesla) para diferentes valores da razão  $\lambda = \frac{b}{2d}$ , que caracterizam a influência de um deslocamento parafuso e o parâmetro  $r = \frac{b}{a}$ .

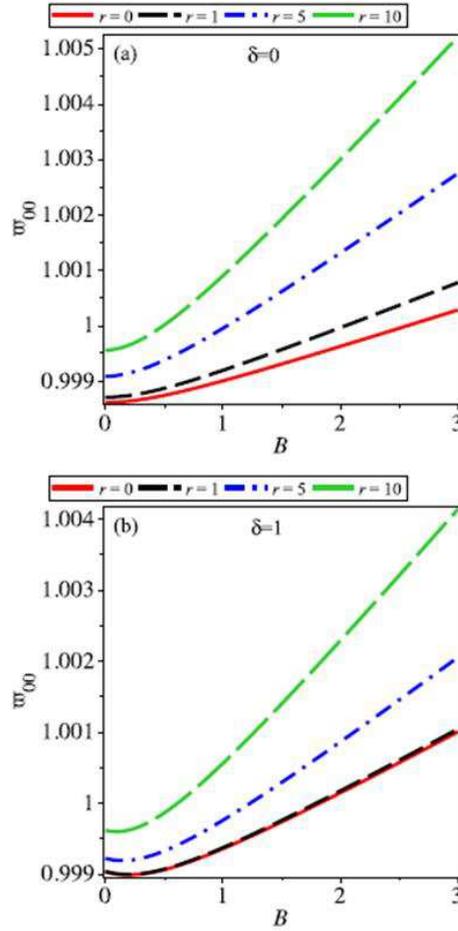


Figura 4.2: Variação da frequência de absorção limiar  $\varpi_{00}$  (em unidade de  $\varepsilon_g$ ) em função de  $B$  para vários valores do parâmetro  $r$ . Em (a), exibimos  $\varpi_{00}$  para a ausência de um fluxo  $\delta = 0$  e em (b), exibimos  $\varpi_{00}$  para  $\delta = 1$ .

A Fig. 4.2(a) mostra as variações das frequências de absorção limiar  $\varpi_{00}$  com um gap de energia  $\varepsilon_g$  fixo, o potencial químico  $V_0$  e do fluxo AB ( $\delta = 0$ ), para quatro valores

de  $\lambda$  positivos e  $r$ . Vê-se que  $\varpi_{00}$  aumenta quando o campo magnético aplicado aumenta. Ele é facilmente visto a partir da figura que a dependência de  $\varpi_{00}$  em  $B$  é não-linear para pequenos campos magnéticos aplicados. Por outro lado, através do aumento do campo magnético as linhas permanecem lineares. Notamos ainda, quando  $r$  aumenta, as curvas da frequência  $\varpi_{00}$  são empurradas para cima em direção do crescimento  $r$ . A 4.2(b) ilustra o comportamento de  $\varpi_{00}$  para diferentes valores do parâmetro  $r$  e o fluxo AB fixo em  $\delta = 1$ . A partir desta figura, podemos ver que a frequência de absorção limiar  $\varpi_{00}$  possui um mínimo para um campo magnético relativamente fraco. Por outro lado, para o comportamento do campo magnético forte é linear. Um aspecto interessante é que o fluxo magnético  $\delta$  contribui para o efeito de cancelamento parafuso do modelo. Na figura este cancelamento ocorrer quando  $\delta = 1$  e  $r = 1$ .

Na Fig. 4.3, temos parcelas das variações da frequência de absorção limiar  $\varpi_{00}$  para ponto quântico (em unidades de  $\rho_0$ ). Vê-se na 4.3(a) que  $\varpi_{00}$  diminui quando o ponto quântico aumenta na ausência do fluxo AB,  $\delta = 0$ . Na 4.3(b), podemos ver que existe uma sobreposição das curvas para  $r = 0$  e  $r = 1$  quando  $\lambda = 1$ , isso indica que o fluxo AB ajuda a cancelar o deslocamento parafuso.

Os efeitos do fluxo AB na frequência de absorção limiar  $\varpi_{00}$  para o anti ponto quântico são apresentados na Fig. 4.4. Na Fig. 4.4(a), exibimos a variação da frequência de absorção limiar  $\varpi_{00}$  para o anti ponto quântico na ausência do fluxo AB  $\delta = 0$  em uma função do campo magnético. Observamos que a dependência de  $\varpi_{00}$  em  $B$  é linear. 4.4(b) mostra a dependência da frequência limiar anti ponto quântico em  $B$  com  $\delta = 1, 0$  para diferentes valores de  $r$ . O comportamento de  $\varpi_{00}$  é semelhante a frequência de absorção da 4.4(a), mas o valor de  $\varpi_{00}$  para  $\delta = 1$  é sempre inferior do que a frequência de absorção  $\varpi_{00}$  quando  $\delta$  assume o valor 0.

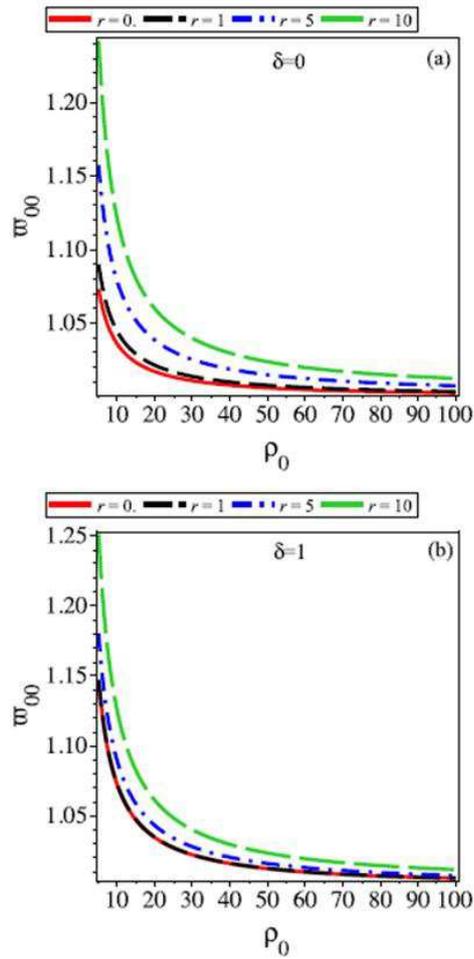


Figura 4.3: As variações das frequências de absorção limiar  $\varpi_{00}$  (em unidade de  $\varepsilon_g$ ) em função de  $\rho_0$  para diferentes valores do parâmetro  $r$ . Em (a), exibimos  $\varpi_{00}$  para  $\delta = 0$  e em (b), exibimos  $\varpi_{00}$  para  $\delta = 1$ .

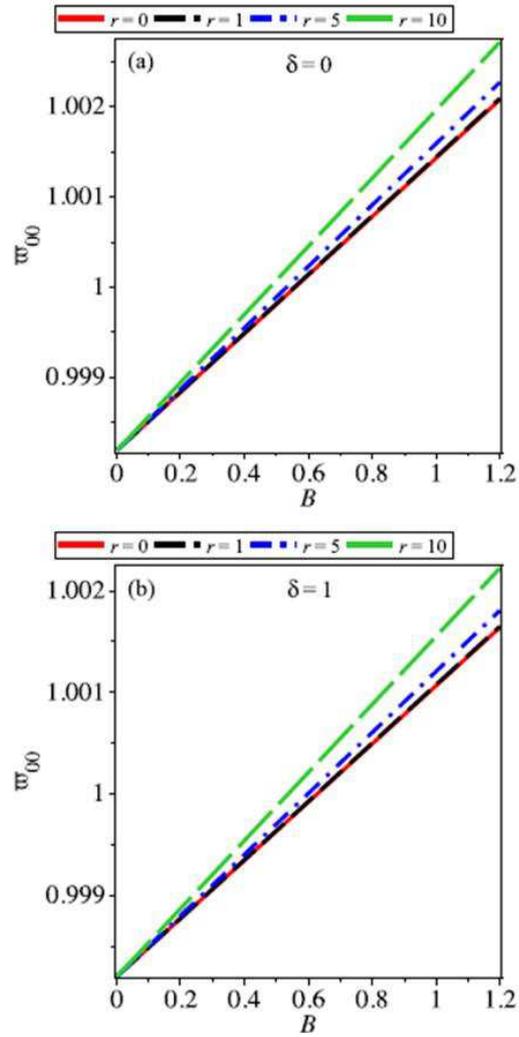


Figura 4.4: A frequência de absorção linear  $\varpi_{00}$  para o anti ponto quântico em função de  $B$  para vários valores do parâmetro  $r$ . Em (a), exibimos  $\varpi_{00}$  para a ausência do fluxo,  $\delta = 0$  (b), exibimos  $\varpi_{00}$  para  $\delta = 1$ .

# Capítulo 5

## Conclusão e perspectiva

Em conclusão, investigamos os níveis de energia para um 2DEG em torno de um deslocamento parafuso sob a interação pseudo harmônica que descreve pontos quânticos e anti pontos quânticos na presença de um campo magnético uniforme  $B$  e de um fluxo  $AB$ .

Sabe-se que tal defeito em meios elásticos gera um campo de torção que atua na partícula como se um fluxo  $AB$  externo fosse aplicado ao mesmo. No habitual efeito AB, as partículas carregadas na presença de um campo magnético uniforme podem ser confinadas a um plano perpendicular às linhas de campo. Isto não é possível em caso de torção, o qual necessita de movimento no espaço tridimensional, de modo a mostrar os seus efeitos. Devido a este fato, consideramos um gás de elétrons quase bidimensional confinado em uma interface fina de tal modo que os efeitos da torção possam se manifestar. Devido à existência de um deslocamento parafuso, consideramos os efeitos de duas contribuições: um termo covariante, que vem da abordagem geométrica no limite do contínuo e um potencial escalar repulsivo não covariante. Ambos aparecem devido a deformações elásticas em um semicondutor com esse tipo de defeito topológico. Verificou-se que este termo não covariante muda significativamente os níveis de energia de elétrons neste sistema. Como dissemos acima, esses defeitos representam um problema, pois eles interferem nas propriedades eletrônicas dos materiais por meio de espalhamento, como se pode observar pela análise do potencial não covariante na Eq.(4.3). Portanto, as investigações sobre a forma como este tipo de defeito influencia a dinâmica dos portadores em semicondutores comuns são importantes para a melhoria da tecnologia eletrônica. No nosso caso, a modificação introduzida por tais defeitos topológicos no coeficiente de absorção da luz é devido a um

momento angular efetivo induzido por torção. Para o valor da frequência de absorção limiar, verificou-se que, como o vetor de Burgers aumentou, as curvas de tal frequência são empurradas para cima no sentido de seu crescimento. Notamos também que o fluxo  $AB$  pode ser ajustado de modo a cancelar a influência do deslocamento parafuso nestas quantidades físicas.

Como uma primeira forma de trabalhar com esse modelo em trabalhos futuros, propomos a verificação dos fenômenos aqui estudados em outros sistemas, incluindo novos parâmetros, como a temperatura ou a pressão no gás de elétrons.

# Referências Bibliográficas

- [1] CHAIKIN, P. M.; LUBENSKY, T. C., Principles of Condensed Matter Physics, Cambridge University Press, Cambridge: Cambridge University Press, (1995).
- [2] NABARRO, F.R.N., Theory of Crystal Dislocations, Dover (Nova Iorque), (1987).
- [3] HEHL F. W. et al. Phys. Rep. 258 1 (1995).
- [4] CARTAN E. C. R., Acad. Sci. (Paris) 174 593 (1922) [Translated into russian: in Albert Einstein i Teoriya Gravitatsii, Moscow: Mir, p. 535, (1979).
- [5] FURTADO, C.; BEZERRA, V. B.; MORAES, F. Quantum scattering by a magnetic flux screw dislocation. Physics Letters A, v. 289, n. 3, p. 160-166, ISSN 0375-9601, (2001).
- [6] LIFSHITZ, I. M.; PUSHKAROV, K. I.; JETP Lett. 11 310 (1970).
- [7] KOSEVICH, A. M., SOV. J.; Low Temp. Phys. 4, 429 (1978).
- [8] KAWAMURA. K., Z. Phys. B 29, 101 (1978).
- [9] AHARONOV, Y.; BOHM., D, Significance of Electromagnetic Potential in the Quantum Theory, Physical Review Letters, Vol. 115, No. 3, (1959).
- [10] BAUSCH, R.; SCHMITZ, R.; TURSKI, L. A., Phys. Rev. Lett 59 13491 (1999).
- [11] BAUSCH, R.; SCHMITZ, R.; TURSKI, L. A., Physics Review Letters 80. p.2257, (1998).
- [12] FURTADO, C.; MORAES, F., Landau levels in the presence of a screw dislocation, Europhys. Lett. 45, 279 (1999).
- [13] BAKKE, K.; MORAES, F., Phys. Lett. A 376 2838 (2012).

- [14] BAUSCH, R.; SCHMITZ, R.; TURSKI, L. A., *Ann. Phys. (Leipzig)* 8, 181 (1999).
- [15] TAIRA, H.; SHIMA H., Optical conductivity of semiconductor crystals with a screw dislocation, *Solid State Communications* 177, 61 (2014).
- [16] DZIALOSHINSKII, I. E; VOLOVIK, G. E., *Ann. Phys.* 125, p.67, (1980).
- [17] KLEINERT, H., *Gauge Fields in Condensed Matter*, volume 2, World Scientific (Cingapura), (1989).
- [18] KATANAEV, M. O.; VOLOVICH, I.V., *Theory of Defects in Solids and Three-Dimensional Gravity*, *Annals of Physics* 216, p.1, (1992).
- [19] HARRIS, W., *Disclination*, *Scientific American*, December, 130 (1977).
- [20] PUNTIGAM, R. A; SOLENG, H.H., *Volterra Distortions, Spinning Strings, and Cosmic Defects*, *Classical and Quantum Gravity* 14, 1129, (1997).
- [21] MARQUES, G.A. de, FURTADO, C., BEZERRA, V.B. e MORAES, F., Landau levels in the presence of topological defects, *Journal of Physics A: Mathematical and General* 34, p.5945, (2001).
- [22] HUNTER, S. C.; NABARRO, F. R. N., *Proc. R. Soc. London A* 220 542 (1953).
- [23] TURSKI, L. A., *Bull. Polon. Acad. Sci. Ser. IV (Mechanics)* 14 289 (1966).
- [24] KADIC, A., EDELEN, D. G. B., *A Gauge Theory of Dislocations and Disclinations*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1983).
- [25] EDELEN, D. G. B.; LAGOUDAS, D. C., *Gauge Theory and Defects in Solids*, in: *Mechanics and Physics of Discrete Systems*, ed. by G. C. Sik, North-Holland, Amsterdam (1981).
- [26] KONDO, K., *Jap. Nat. Congr. Applied Mechanics: Proc. (Tokyo)* 2 41 (1952).
- [27] BILBY, B. A., BULLOUGH, R.; SMITH, E., *Proc. R. Soc. London A* 231 263 (1955).
- [28] KRÖNER, E., in: *Physics of Defects*, ed. by R. Balian et al., North-Holland, Amsterdam, p. 215 (1981).

- [29] KLÉMAN, M., Lines and Walls Points,(New York: Wiley), (1983).
- [30] FURTADO, C.; DA CUNHA, B. G.C.; BEZERRA, V. B.; MORAES, F., Landau Levels in the Presence of Disclinations, Phys. Lett. A 195, 90 (1994).
- [31] DE LIMA, André G. et al. Screw dislocation-induced influence of transverse modes on Hall conductivity. The European Physical Journal B, v. 86, n. 11, p. 1-6, (2013).
- [32] LIMA, A. A., FILGUEIRAS, C., Eur. Phys. J. B 85, 401 (2012).
- [33] WEISBUCH, C.; VINTER, B., Quantum Semiconductor Structures: Fundamentals And Applications, Academic Press, (1991).
- [34] REED, M. A., Nanostructures And Mesoscopic Systems. Academic Press, (1992).
- [35] BRUCHEZ, M. P., JR., MORONNE, M., GIN, P., WEISS, S., ALIVISATOS, A. P., Semiconductor Nanocrystals as fluorescent Biological Labels. Science, 281 (5385) 2013-2016, (1998).
- [36] PAGNOSSIN, I.R., Propriedades de transporte elétrico de gases bidimensionais de elétrons nas proximidades de pontos- quânticos de InAs. 165f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de São Paulo, (2004).
- [37] DOOSE, S., Single-Molecule Characterization of Photophysical and Colloidal Properties of Biocompatible Quantum Dots, 188f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de Heidelberg. (2003).
- [38] WILLIAMS, S. C., Patterning Nanocrystals Using DNA, 200f, Tese (Doutorado em Química) - Universidade da Califórnia, (2003).
- [39] HINZER, K., Semiconductor Quantum Dot Lasers, 110f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de Ottawa, (1998).
- [40] KASTNER, M.A., Artificial atoms, Physics Today, 46, 1, pp.24-31, (1993).
- [41] FOLK, J.A., PATEL, S.R., GODIJJN, S.F., HUIBERS, A.G., CRONENWETT, S.M., MARCUS, C.M., CAMPMAN, K.; GOSSARD, A.C., Phys. Rev. Lett. 76, 1699, (1996).

- [42] ALHASSID, Y., GEFEN, Y., Spectral scrambling in Coulomb-blockade quantum dots (unpublished), (2000).
- [43] KITTEL, C., Introduction to Solid State Physics, 8ed., John Wiley e Sons, (2005).
- [44] AVISHAI, Y., HATSUGAI, Y. e KOHMOTO, M., Persistent currents and edge states in a magnetic field, Physical Review B, 47, p.9501, (1993).
- [45] AVISHAI, Y. e KOHMOTO, M., Quantized persistent currents in quantum dot at strong magnetic field, Physical Review Letters, 71, p.279, (1993).
- [46] KUMAGAI, M. e OHNO, T., Topology in Artificial Structures, Solid State Communications, 83, 11, p.837, (1992).
- [47] FUHRER, A., LÜSCHER, S., IHN, T., HEINZEL, T., ENSSLIN, K., WEGSCHEIDER, W. e BICHLER, M., Energy spectra of quantum rings, Nature, 413, p.822, (2001).
- [48] KLAMA, S., The electron energy spectrum of a circular ring in an external magnetic field , Journal of Physics: Condensed Matter 5, p.5609, (1993).
- [49] TAN, W. C. e INKSON, J.C., Electron states in a two-dimensional ring - an exactly soluble model, Semiconductor Science and Technology, 11, p.1635, (1996).
- [50] SAKURAI, J.J., Modern Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Company, (1994).
- [51] GRIFFITHS, D, J, mecânica quântica 2e, pearson, (2011).
- [52] TONOMURA, A, et al, Evidence for Aharonov-Bohm effect with magnetic field completely shielded from electron wave, Phys. Rev. Lett. 56, 792 (1986).
- [53] BRANSDEN, B.H., JOACHAIN, C.J., Quantum Mechanics, 2nd edition, Pearson Education, England, (2000).
- [54] SAGE, M., GOODISMAN, J., Am. J. Phys. 53 350. (1985).
- [55] IKHDAIR, S.M., SEVER, R., MOL J., Struct.: Theochem 806 155. (2007).
- [56] ÇETIN, A., Phys.Lett. A372, 3852 (2008).

- [57] BOGACHEK, E.N., LANDMAN, U., Phys. Rev. B 52 (19) 14067 (1995).
- [58] IKHDAIR, S.M.; HAMZAVI, M., A quantum pseudodot system with two-dimensional pseudoharmonic oscillator in external magnetic and Aharonov-Bohm fields, Physica B: Condensed Matter 407, 4198 (2012).
- [59] FILGUEIRAS, C., SILVA, E. O., OLIVEIRA, W.; MORAES, F., The effect of singular potentials on the harmonic oscillator, Ann. Phys. (NY) 325, 2529 (2010).
- [60] ATOYAN, M., KAZARYAN, E.; SARKISYAN, H. Direct interband light absorption in a cylindrical quantum dot in quantizing magnetic field, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 22, 860, (2004).
- [61] ATOYAN, M., KAZARYAN, E.; SARKISYAN, H., Interband light absorption in parabolic quantum dot in the presence of electrical and magnetic fields, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 31, 83 (2006).
- [62] RAIGOZA, N., MORALES, A.; DUQUE, C., Effects of hydrostatic pressure on donor states in symmetrical GaAs Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As double quantum wells, Physica B: Condensed Matter 363, 262 (2005).
- [63] KHORDAD, R., Effects of magnetic field and geometrical size on the interband light absorption in a quantum pseudodot system, Solid State Sciences 12, 1253 (2010).