UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

# INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON EM PONTOS QUÂNTICOS SEMICONDUTORES POLARES

Solemar Silva Oliveira

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

Orientador: Prof. Dr. Guo-Qiang Hai

USP/IFSC/SBI
8-2-001702

SÃO CARLOS
2005

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Oliveira, Solemar Silva

"Interação elétron-fônon em pontos quânticos semicondutores polares"
Solemar Silva Oliveira – São Carlos, 2005

Tese (Doutorado) – Área de Física Básica do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo
2005 - Páginas: 120

Orientador: Prof. Dr. Guo-Qiang Hai
1. Elétron-Fônon

I. Título

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

Caixa Postal 369
13560-970 São Carlos, SP
Av. Trabalhador São-carlense, 400,
13560-970 São Carlos, SP

Fone/Fax 16 3373 9777
www.ifsc.usp.br
sladeroz@ifsc.usp.br

*MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE SOLEMAR SILVA OLIVEIRA APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 29/08/2005.*

*COMISSÃO JULGADORA:*

*Prof. Dr. Guo-Qiang Hai (Orientador e Presidente) – IFSC/USP*

*Prof. Dr. Nelson Studart Filho – UFSCar*

*Prof. Dr. Marcos Henrique Degani – UFC*

*Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior – IFSC/USP*

*Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes – IFSC/USP*

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

# Agradecimentos


- Agradeço especialmente ao Prof. Dr. Guo-Qiang Hai pela orientação, paciência e amizade.
- Ao Dr. Vitor López-Richard pela colaboração.
- Ao Doutorando Leonardo Kleber Castelano pela colaboração e amizade.
- À minha querida esposa Flávia pelo carinho, companheirismo, força e paciência.
- À minha irmã Marilene pelo apoio, força e amizade.
- Ao Haroldo pelo apoio técnico e computacional.
- À Isabel Rosani pela ajuda.
- À Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro.

**Para Cecília**

# Lista de Figuras


1.1 Funções de onda do elétron confinado em duplo poço quântico retangular e finito para vários valores da largura de um dos poços mantendo fixa em 100Å a largura do outro poço. O valor da barreira é de 30 Å. . . . . 11

1.2 Estrutura de níveis de energia em função da largura de um do poço $W_2$. $W_1 = 100$Å e $W_B = 60$ Å. O confinamento parabólico em x e y é $\Omega/\omega_{LO} = 1.0$. . . . . 12

1.3 Estrutura de níveis de energia em função da largura de um do poço $W_2$. $W_1 = 100$Å e $W_B = 30$ Å. O confinamento parabólico em x e y é $\Omega/\omega_{LO} = 1.0$. . . . . 13

2.1 Níveis de energia $E_{n,m}$ como uma função do campo magnético em um ponto quântico. 21

2.2 (a) Taxa de espalhamento entre diferentes estados como uma função da freqüência de confinamento no plano $x$-$y$ num ponto quântico de largura $W = 50$ Å. (b) Mapeamento da taxa de espalhamento do estado $(0, \pm 1)$ para o estado fundamental $(0, 0)$ no plano $\Omega$-$W$. . . . . 25

2.3 Taxa de espalhamento do estado (a) $(0, -1)$ e (b) $(0, -1)$ para o estado fundamental $(0, 0)$ como uma função do campo magnético para $\Omega = 2$ meV e $W = 30$, 100, e 300 Å. O quadro mostra o elemento de matriz na direção $z$ como uma função de $\theta$. Mapeamento do contorno da taxa de espalhamento dos estados $(0, 1)$ e $(0, -1)$ para o estado fundamental $(0, 0)$ no plano $B$-$W$ para $\Omega = 2$ meV. . . . . 27

2.4 Diagrama de transições. . . . . 28

2.5 (a) e (b) Taxa de espalhamento entre diferentes estados como uma função do campo magnético em pontos quânticos com $\Omega = 2$ meV e $W = 50$ Å. (c) Taxa de espalhamento da Fig. 2.5(a) é plotada como uma função da diferença de energia entre os níveis. . . . . 29

2.6 Tempo de relaxação do elétron do estados (a) $(0, -1)$, $(0, -2)$, $(0, -3)$ e (b) $(0, 1)$ para o estado fundamental $(0, 0)$ como uma função do campo magnético num ponto quântico de $\Omega = 2$ meV e $W = 50$ Å. As curvas coloridas mostram os vários canais de relaxação que são abertos em função do campo magnético. . . . . 32

2.7 (a) Diagrama de transição e (b) as taxas de espalhamento como uma função da largura da barreira em dois pontos quânticos acoplados com $W = 100$ Å na ausência de campo externo. . . . . 34

2.8 Taxa de espalhamento como uma função do campo magnético em pontos quânticos acoplados para diferentes largura da barreira com $\Omega = 2\ meV$ e $W = 10$ Å. . . . . 35

2.9 Efeitos do campo elétrico na taxa de espalhamento como uma função do campo magnético. . . . . 36

2.10 (a) Dependência da taxa de espalhamento com o campo magnético para a transição do estado (0,1,0) para o estados fundamental (0,0,0) em CQDs. (b) Os números indicam diferentes canais de espalhamento. Consideramos $\hbar\Omega = 2\ meV$, $W = 100$ Å, $W_B = 30$ Å. . . . . 38

3.1 Energia do polaron (curva sólida) calculada como uma função da largura relativa $W_2/W_1$ dos dois pontos quânticos acoplados para T = 0 K com $W_1 = 100$ Å e $W_B = 30$Å. A curva pontilhada é energia do elétron e a curva tracejada-pontilhada é energia do elétron + um fônon LO. . . . . 45

3.2 Energia do polaron (curva sólida) calculada como uma função da largura relativa $W_2/W_1$ dos dois pontos quânticos acoplados para T = 300 K com $W_1 = 100$ Å e $W_B = 30$Å. A curva pontilhada é energia do elétron e a curva tracejada-pontilhada é energia do elétron + um fônon LO. . . . . 46

3.3 Fator de tunelamento para $T = 300K$ como uma função da largura relativa entre os pontos quânticos $(W_2/W_1)$. A linha sólida (pontilhada) corresponde à transferência de carga efetiva devido a emissão (absorção) de fônon virtual ressoante do estado excitado (0,0,1) [estado fundamental (0,0,0)] para o estado fundamental (0,0,0) [estado excitado (0,0,1)]. O quadro mostra a intensidade da interação elétron-fônon LO como uma função da largura da barreira entre os pontos quânticos $(W_B/W_1)$. . . . . 51

3.4 Orbitais eletrônicos para $W_2/W_1$=0,85. Os orbitais do elétron sem acoplamento são mostrados nas figuras (a) $(0,0,0)$ , (b) $(0,0,1)$ e (c) $(1,0,0)$. Os orbitais eletrônicos renormalizados devido aos efeitos polarônicos são mostrados em (d) $(0,0,0)$ e (e) $(0,0,1)$. Em (f) a curva sólida (tracejada) mostra parte do contorno do orbital do estados $(0,0,1)$ no ponto quântico de largura $W_1$ com e sem os efeitos polarônicos. . . 55

3.5 Espectro de absorção com $e_L//x$ para diferentes tamanhos relativos dos pontos quânticos $W_2/W_1$. As diferentes curvas no quadro apresentam uma separação $\Delta\,(W_2/W_1) = 0,04$. O quadro inserido mostra a posição dos picos de absorção. A linha tracejada representa a posição das transições ópticas permitidas para elétron sem interação. . . 57

3.6 Espectro de absorção com $e_L//z$ para diferentes tamanhos relativos dos pontos quânticos $W_2/W_1$. As diferentes curvas no quadro apresentam uma separação $\Delta\,(W_2/W_1) = 0,046$. O quadro inserido mostra a posição dos picos de absorção. A linha tracejada representa a posição das transições ópticas permitidas para elétron sem interação. . . 58

4.1 (a) Constantes $C_1$, $\gamma$, $\eta$ e $\kappa$ como função da freqüência adimensional de confinamento $\Omega_x$. (b) Níveis de energia $\epsilon_0$ e $\epsilon_1$ renormalizados pelo efeito da interação elétron fônon LO e deslocados pela quantidade igual a energia polarônica no subespaço $N = 1$. . . . 65

4.2 Níveis de energia do elétron acoplado com os fônons LO em função do confinamento lateral para um ponto quântico. . . . . 72

4.3 (a) Densidade espectral considerando o potencial químico igual a $(\epsilon_0 + \epsilon_1)/2$ e (b) Densidade de estados possíveis quando para a potencial químico possui uma energia inferior ao valor do estado fundamental renormalizado. Vários valores de temperatura são considerados. . . . . 74

4.4 Densidade de estados possíves do polaron para sistema de dois níveis considerando vários valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. $T = T_0/100$. . . . . 76
4.5 Densidade espectral para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado do polaron no ponto quântico considerando vários valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura considerada é $T = 3T_0/4$. . . . . 78
4.6 Densidade espectral para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado do polaron no ponto quântico considerando vários valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura considerada é $T = T_0/4$. . . . . 79
4.7 Intensidade da matriz de acoplamento elétron-fônon LO entre dois estados eletrônicos. 85
4.8 Comparação entre o resuldado da densidade espectral do elétron acoplado com os fônons LO em um disco cilíndrico considerando dois níveis de energia $(0,0,0)$ $e$ $(1,0,0)$ (curva sólida) com o resultado para quatro níveis de energia $(0,0,0)$, $(1,0,0)$, $(0,1,0)$ e $(1,1,0)$ (curva pontilhada). Consideramos três valores da freqüência de confinamento $\Omega$. . . . . 87
4.9 Densidade espectral do elétron acoplado com os fônons LO em um ponto quântico simples com largura $W = 100$Å na direção $z$ e um confinamento lateral anisotrópico $\Omega_y = 1.5\Omega_x$. Consideramos cinco valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura é $T = 3T_0/4$. . . . . 89
4.10 Densidade espectral do elétron acoplado com os fônons LO em um ponto quântico simples com largura $W = 100$Å na direção $z$ e um confinamento lateral anisotrópico $\Omega_y = 1.5\Omega_x$. Consideramos cinco valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura é $T = T_0/4$. . . . . 90
4.11 Densidade espectral do elétron acoplado com os fônons LO em um ponto quântico simples com largura $W = 100$Å na direção $z$ e um confinamento lateral anisotrópico $\Omega_y = 1.5\Omega_x$. Consideramos cinco valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura é $T = 3T_0/4$. . . . . 93
4.12 Densidade espectral do elétron acoplado com os fônons LO em um ponto quântico simples com largura $W = 100$Å na direção $z$ e um confinamento lateral anisotrópico $\Omega_y = 1.5\Omega_x$. Consideramos cinco valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura é $T = T_0/4$. . . . . 94
4.13 Níveis de energia do elétron acoplado com os fônons LO em função do confinamento lateral para um ponto quântico. (a) $\alpha = 0.3$ e (a) $\alpha = 1.0$. . . . . 96
4.14 Densidade de estados do polaron para temperatura T=$T_0/100$ para $\alpha = 1.0$, considerando vários valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$, para (a) o estado fundamental e (b) o estado primeiro estado excitado. . . . . 98
4.15 Densidade de estados do polaron para temperatura T=$T_0/100$ para $\alpha = 1.0$, considerando vários valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$, para (a) o estado fundamental e (b) o estado primeiro estado excitado. . . . . 99
4.16 Densidade de estados do polaron para temperatura T=$T_0/100$ para $\alpha = 3.0$, considerando $\Omega_x = 1.0$, para (a) o estado fundamental e (b) o estado primeiro estado excitado. . . . . 100

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

4.17 Resultado da densidade de estados para um elétron acoplado com os fônon LO em um sistema com apenas um nível e temperatura zero. Consideramos 4 constantes de acoplamento. . . . . 101

# Conteúdo

**Resumo** **vii**

**Abstract** **ix**

**1 Introdução Geral** **1**

1.1 Introdução . . . . . 1
1.2 Modelo teórico e estrutura eletrônica dos pontos quânticos . . . . . 7
1.3 Interação elétron-fônon . . . . . 14
1.4 Elemento de matriz da interação elétron-fônon . . . . . 16

**2 Espalhamento por fônon LA e relaxação dos elétrons** **18**

2.1 Introdução . . . . . 18
2.2 Elétron confinado num ponto quântico em um campo magnético . . . . . 19
2.3 Taxa de espalhamento elétron-fônon LA . . . . . 20
2.4 Resultados numéricos . . . . . 23
2.4.1 Um ponto quântico . . . . . 23
2.4.2 Dois pontos quânticos acoplados . . . . . 31
2.5 Conclusão . . . . . 39

**3 Tunelamento assistido por fônons LO em pontos quânticos acoplados** **40**

3.1 Introdução . . . . . 40
3.2 Efeito polarônico nos estados do elétron em pontos quânticos acoplados . . . . . 41
3.3 Tunelamento assistido por fônon LO . . . . . 47
3.4 Modificações nos orbitais eletrônicos . . . . . 52
3.5 Efeitos no espectro de absorção óptica . . . . . 54
3.6 Conclusão . . . . . 59

**4 Efeito polarônico na densidade de estados em pontos quânticos** **60**

4.1 Introdução . . . . . 60
4.2 O modelo não-perturbativo . . . . . 61
4.2.1 Diagonalização exata . . . . . 64
4.2.2 A função espectral . . . . . 69
4.3 Resultados com o método não-perturbativo . . . . . 70
4.4 O modelo da função de Green . . . . . 80

4.5 Resultados com função de Green . . . . . 86
4.6 Comparações entre os dois métodos . . . . . 91
4.7 Acoplamento forte . . . . . 95
4.8 Conclusão . . . . . 102

**5 Conclusões** **103**

**Apêndice** **107**
A.1 Auto-energia do elétron acoplado com os fônons . . . . . 107
A.2 Modelo não-perturbativo . . . . . 111
A.3 Dedução da função espectral . . . . . 112

**Bibliografia** **115**

# Resumo

O objetivo deste trabalho é examinar os efeitos causados pela interação elétron-fônon em pontos quânticos semicondutores polares.

Primeiramente, nós apresentamos cálculos detalhados da taxa de espalhamento e do tempo de relaxação eletrônico em pontos quânticos simples (Single Quantum Dot - SQD) e em dois pontos quânticos acoplados (Coupled Quantum Dots - CQDs) devido à interação entre o elétron e os fônons longitudinais acústicos (LA) na presença e na ausência de campos externos, magnético ou elétrico. O regime de energia usado no cálculo do espalhamento eletrônico foi escolhido de forma que os fônons LA dominam o processo de espalhamento. Nós verificamos que na ausência de campo externo, a taxa de espalhamento do elétron por fônons LA entre dois níveis específicos é essencialmente determinada pela diferença de energia entre estes dois níveis. Observamos que um campo magnético modula fortemente a taxa de espalhamento. Verificamos que o processo de relaxação via multicanais desempenha um papel essencial no mecanismo de relaxação do elétron de estados excitados para o estado fundamental. Um campo magnético externo aumenta ainda mais a relaxação através de transições indiretas.

Também fizemos um estudo teórico dos efeitos da interação elétron-fônons longitudinais ópticos (LO) em dois pontos quânticos acoplados compostos de $InAs/AlInAs$. Fizemos cálculos para o polaron ressonante num regime onde a energia de confinamento do elétron é comparável à energia do fônon LO utilizando o formalismo da função de Green e teoria de perturbação considerando temperatura zero e finita. Observamos uma renormalização do estado

fundamental obtida devido a absorção de fônons virtuais para uma temperatura $T > 0$. Discutimos os efeitos do tunelamento entre os pontos quânticos e a sua influência nas propriedades eletrônicas e analisamos o espectro de absorção óptica neste sistema. Verificamos modificações nos orbitais eletrônicos como resultado direto do tunelamento assistido por fônons.

Finalmente, avaliamos os efeitos da interação elétron-fônons LO na densidade de estados do elétron confinado em pontos quânticos utilizando dois modelos distintos: Um modelo não-perturbativo e o formalismo da função de Green. Estudamos cada método separadamente e avaliamos a densidade de estados como função da temperatura e do confinamento lateral. Consideramos um sistema com apenas dois níveis eletrônicos de energia e comparamos os dois métodos avaliando as suas diferenças básicas. Utilizando o método não-perturbativo fizemos cálculos da densidade de estados para um regime de acoplamento forte entre o elétron e os fônons LO.

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

# Abstract

The purpose of this work is to study effects of electron-phonons interactions in polar semiconductor quantum dots.

Firstly, we present a detailed calculation on the electron-LA-phonon scattering rates and electron relaxation processes in single and coupled quantum dots in the absence and in the presence of external magnetic or electric fields. In the absence of external field, interplay among the effective confinement lengths in different directions as well as the phonon wavelength leads to a strong oscillation of the LA-phonon scattering rate between two levels. In other words, the scattering depends strongly on the geometry and confinement potential of the quantum dot. An external magnetic field also strongly modulates the scattering rate in several orders of magnitude. The magnetic field induced effects are very similar in single quantum dot (SQD) and coupled quantum dots (CQDs) where the effective confinement strength in the $z$-direction affects strongly the scattering rate. However, we find that the multiple relaxation process plays an essential role for electron relaxing from the excited states to ground state both in single and coupled quantum dots. Including all possible relaxation channels, an external magnetic field enhances the relaxation through indirect transitions.

Secondly, we present a theoretical study on the effects of electron-LO-phonon interaction in two coupled stacked $InAs/InAlAs$ quantum dots. The contribution of resonant and nonresonant electron–LO-phonon coupling to the polaron states are obtained in the framework of the Green function formalism and the perturbation approach at zero and finite temperatures.

Ground state renormalization is found due to virtual phonon absorption at $T > 0$. Tunneling effects between the dots have been addressed and their influence on the electronic properties and optical absorption are analyzed. Topological modifications of electronic orbitals are found as a result of phonon-assisted tunneling.

Finally, we investigate the effects of electron-LO-phonon interaction on the electron density of states in quantum dots using two distinct models. A non-perturbative model and the Green function formalism. Within the non-perturbative model, we consider only two electronic levels in a quantum dot interacting to LO-phonons. An exact solution is obtained for the polaron states and spectral function. We evaluate the density of states in the regime at zero and finite temperature for several values of the lateral confinement. We compare the density of states obtained within the two models. Furthermore, we study the polaron effects in strong electron-LO-phonon coupling regime based on the non-perturbative model.

# Capítulo 1

# Introdução Geral

## 1.1 Introdução

O estudo das nanoestruturas semicondutoras é atualmente o foco central da física de semicondutores. Quando num cristal, as dimensões espaciais são reduzidas a valores abaixo do comprimento de onda de De Broglie para o elétron, o confinamento resultante modifica fortemente o espectro de energia da estrutura, ou seja, modifica a sua densidade de estados, com relação ao material bulk, visto que a energia cinética da partícula passa a ter valores discretos permitidos na direção do confinamento. As propriedades físicas destas estruturas são interessantes e dinamicamente diferentes das propriedades observadas em bulk. Como resultado deste confinamento nas três direções espacias, obtemos o chamado ponto quântico [1], [2]. Esta estrutura apresenta propriedades eletrônicas que são influenciadas pela forma tipo função-$\delta$ da sua densidade de estados. Nos sistemas que apresentam um confinamento em três dimensões a estrutura de bandas de energia sofre uma mudança da forma de bandas contínuas para um conjunto de níveis discretos. Em materiais semicondutores, o comprimento de onda de De Broglie é da ordem de algumas dezenas de nanômetros, sendo necessária, portanto, a produção de estruturas desta dimensão para se observar os efeitos do confinamento tridimensional. O estudo das propriedades físicas de pontos quânticos semicondutores é de vital importância para



IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

aplicações em dispositivos optoeletrônicos, tais como, transistores baseados em um elétron e laseres de pontos quânticos [3]-[6]. É interessante avaliar as propriedades de pontos quânticos acoplados, que são usados para simular propriedades de pontos quânticos auto-organizados e moléculas artificiais, e possuem um potencial uso em computação quântica. [7]-[14].

Existem várias formas de se obter um confinamento geométrico em três dimensões e por isso diversas estruturas são chamadas pontos quânticos. Atualmente vários modelos teóricos e técnicas experimentais são desenvolvidas para o estudo dos pontos quânticos. Experimentalmente a forma mais comum para a confecção de pontos quânticos é, inicialmente, a produção de uma estrutura bidimensional, como um poço quântico fabricado a partir de epitaxia que controla precisamente a espessura do filme e em seguida a obtenção do confinamento lateral através da definição física das bordas da estrutura. Faz-se um desenho geométrico para as laterais da estrutura da amostra, após o crescimento, através de litografia de alta resolução. Logo após, um ataque químico corrói a amostra até a camada bidimensional produzindo a nanoestrutura desejada. Teoricamente vários modelos são utilizados para calcular as propriedades físicas dos pontos quânticos. Por exemplo: a determinação da estrutura eletrônica estudando as bandas de valência e a não-parabolicidade da banda de condução através de modelos de multisubanda, etc. [15]-[17]. Um estudo importante em sistemas semicondutores de baixa dimensinalidade são os efeitos da interação entre o elétron e os fônons ópticos e acústicos. Esta interação já foi bastante estudada em bulk e em diversas heteroestruturas semicondutoras. Especialmente a interação dos elétrons com os modos de fônons longitudinais ópticos (LO), cujo acoplamento forma uma quase partícula denominada de polaron, diversos cálculos foram feitos, dentre eles podemos citar: efeitos polarônicos, ressonância de cíclotron, taxa de espalhamento eletrônico, acoplamento plasma-fônon, relaxação de elétron quentes, etc [18]- [27]. Atualmente os efeitos destas interações são bastantes explorados em fios e pontos quânticos. [28]-[37].

Devido ao grande potencial para aplicações tecnológicas, os pontos quânticos semicondutores recebem grande atenção. Entretanto, existe a necessidade de se conhecer as propriedades ópticas importantes nestes materias, propriedades estas que determinam a eficiência da utilização dos pontos quânticos em dispositivos. O estudo do mecanismo da relaxação eletrônica, bem como uma descrição precisa da densidade de estados de elétrons nestas estruturas semicondutoras, torna-se realmente essencial. Os estados eletrônicos, em todas as estruturas do estado sólido estão sujeitos a diferentes mecanismos de espalhamento. Embora a influência de imperfeições (impurezas, flutuações na largura da camada) possa, em muitos casos, ser controlada experimentalmente, o espalhamento do elétron através dos fônons presentes no material é inerente ao estado sólido da matéria. A emissão de fônons é na maioria das vezes o único mecanismo de espalhamento não radiativo importante, visto que o espalhamento por impurezas é elástico [38] e [39].

A maioria dos pontos quânticos semicondutores são produzidos usando materiais semicondutores III-V polares onde a interação elétron-fônon longitudinal óptico (LO) é importante. Em semicondutores III-V, o acoplamento elétron-fônon (LO) é considerado num regime de acoplamento fraco devido ao fato que a constante do acoplamento elétron-fônon LO é muito pequena, $\alpha << 1$ [ver a definição neste capítulo] [10], [18]-[20], [37], [40]-[42]. Em materiais bulk, estruturas bidimensionais e unidimensionais de semicondutores polares, o processo de relaxação do elétron devido à interação elétron-fônon LO é bem conhecido, sendo que num regime de acoplamento fraco, ela pode ser descrita utilizando a regra de ouro de Fermi. Nos primeiros trabalhos sobre espalhamento e relaxação dos elétrons em pontos quânticos semicondutores, considerou-se a relaxação do elétron via emissão de fônons LO no regime de acoplamento fraco [38], [43] e [44]. Por causa da natureza discreta da energia e da densidade de estados do elétron nos pontos quânticos e o valor constante da freqüência dos fônons LO, sugere-se que a relax-

ação eletrônica assistida por fônons LO seja possível apenas se a separação entre os diferentes níveis eletrônicos possuir valores da ordem da energia de um ou mais fônons LO [45], o que é comumente conhecido como efeito de fônon bottleneck. Apesar do efeito bottleneck ter sido proposto com base em cálculos teóricos simples a partir da regra de ouro de Fermi, estudos posteriores mostraram que o acoplamento elétron-fônon LO e os processos de relaxação do elétron são muito mais complicados. [47]-[51].

Em pontos quânticos semicondutores auto-organizados, onde a transição de energia do primeiro estado excitado para o estado fundamental é comparável com a energia de um fônon LO, estudos teóricos e experimentais mostraram que ocorre o fenômeno denominado "ever-lasting polaron states" [52], [53]. O estado excitado do elétron no ponto quântico está fortemente acoplado com o estado fundamental acrescido da energia de um fônon LO, e forma estados de polaron ressonante que são dinamicamente estáveis. Isto é, embora a interação elétron-fônon LO em pontos quânticos semicondutores polares possa estar num regime de acoplamento forte através dos efeitos do polaron ressonante, ela não contribuirá para processo de relaxação do elétron de estados excitados para o estado fundamental. Estudos recentes revelaram que a relaxação dos elétrons em pontos quânticos auto-organizados ocorre devido aos processos mais complexos envolvendo interações fônon-fônon [9]. Resultados experimentais recentes confirmaram que a relaxação do elétron em pontos quânticos auto-organizados acontece devido a processos que envolvem um fônon LO e 2 fônons longitudinais acústicos (LA) levando um tempo de relaxação próxima 100 ps. [6]

Por outro lado, em pontos quânticos com dimensões maiores, a diferença de energia entre os níveis é muito menor que a energia do fônon LO, então a interação elétron-fônon LA desempenha um papel importante. Diferente dos fônons LO, que possuem uma relação de dispersão praticamente constante, os fônons LA possuem uma relação de dispersão linear com o

vetor de onda [54]. A eficiência da interação elétron-fônon LA está relacionada aos fônons LA de longo comprimento de onda, consequentemente, com baixa energia. Em pontos quânticos verticais ou laterais, quando a separação entre os níveis de energia é pequena ($< 10$ meV), a interação elétron-fônon LA é dominante. O espalhamento elétron-fônon LA domina a decoerência da relaxação do elétron em pontos quânticos semicondutores. O espalhamento através de fônons LA é o mecanismo de espalhamento mais importante, que determina aplicações de pontos quânticos na confecção de dispositivos quânticos tais como "quantum logic gates" e "single-electron devices". O espalhamento elétron-fônon LA em pontos quânticos foi calculado por Bockelmann [38]. Talvez por causa de sua aparente simplicidade, um estudo sistemático dos processos de relaxação devido a emissão de fônon LA nunca foi apresentado. Em publicação recente, Bertoni e colaboradores [55] e [56], mostraram que o tempo de relaxação devido ao espalhamento elétron-fônon LA pode ser fortemente aumentado por um campo magnético externo em dois pontos quânticos acoplados e o tempo de relaxação pode ser aumentado para dezenas de $\mu s$.

Para um melhor entendimento da energia de relaxação de elétrons interagindo com fônon LO e LA em pontos quânticos semicondutores é interessante calcularmos a função espectral $A(E)$ (densidade espectral de estados) do elétron acoplado com estes modos de fônons [57]. A densidade espectral é usualmente calculada através do formalismo da função de Green [52], [58]-[60]. Diferentes formalismos são aplicados para esclarecer a forma dos estados confinados para o polaron. Utilizando um modelo não-perturbativo, Stauber e colaboradores [61], apresentam resultados para a função espectral, que apresenta picos relacionados a funções delta de Dirac. Utilizando também um método não-perturbativo e função de Green, Vasilevskiy e co-autores [62] realizam cálculos para a densidade de estados do polaron e do éxciton em pontos quânticos. A discussão em torno da função espectral e da densidade de estados do elétron

acoplado com os fônons em pontos quânticos fica dividida basicamente em dois modelos, um não-pertubativo e o formalismo da função de Green que aparentemente não fornecem os mesmos resultados. A função de Green, para temperatura finita, fornece uma largura para os picos da função espectral enquanto o método não-perturbativo, como foi dito, apresenta funções delta de Dirac.

Na presente tese apresentamos um estudo da interação elétron-fônon em pontos quanticos semicondutores e os seus efeitos relevantes. Neste capítulo, apresentamos os modelos teóricos para um ponto quântico simples e dois pontos quânticos acoplados. No Capítulo 2, utilzando a regra de ouro de Fermi estudamos o espalhamento elétron-fônon LA e a relaxação dos elétrons nos pontos quânticos simples e acoplados compostos de *GaAs-AlGaAs*, levando em consideração o efeito de campos externos. Mostramos a relaxação do elétron de estados excitados para o estado fundamental nestes pontos quânticos, verificamos que os processos de multicanais pode ser dominante. Um campo magnético externo não aumentará o tempo de relaxação como declarado numa publicação recente, por Bertoni e seus colaboradores [55]. Pelo contrário, um campo magnético externo diminui o tempo de relaxação. No Capítulo 3, estudamos interação eletron-fonon LO em pontos quânticos acoplados compostos de *InAs-InAlAs*, escolhemos esta estrutura pois a massa do elétron neste material possui um valor menor que para o *GaAs* permitindo observar melhor os efeitos de tunelamento. Apresentaremos cálculos para o polaron num regime de acoplamento ressonante utilizando teoria de perturbação com temperatura zero e finita. Mostraremos resultados da renormalização do estado fundamental, que é obtida a partir da absorção de fônons virtuais quando a temperatura é $T > 0$. Mostraremos ainda os efeitos do tunelamento entre os pontos quânticos e a sua influência nas propriedades eletrônicas e apresentaremos resultados para o espectro de absorção óptica nos pontos quânticos acoplados. Mostraremos modificações nos orbitais eletrônicos como resultado

direto do tunelamento assistido por fônons. No Capítulo 4 fornecemos um estudo detalhado da densidade espectral de estados num ponto quântico simples de *GaAs-AlGaAs* utilizando dois modelos. Com resultados do modelo não-perturbativo e do método da função de Green nós fizemos nossas discussões e analisamos as diferenças básicas entre estes dois modelos. Considerando temperatura zero e finita, discutimos a viabilidade do uso da função de Green e do modelo não-pertubativo para o caso do polaron nos pontos quânticos. E finalmente, no Capítulo 5, apresentamos nossas conclusões.

## 1.2 Modelo teórico e estrutura eletrônica dos pontos quânticos

Consideramos pontos quânticos semicondutores com o seguinte potencial de confinamento

$$V(x,y,z) = V_{\parallel}(x,y) + V_{\perp}(z) \tag{1.1}$$

onde os termos $V_{\parallel}(x,y)$ e $V_{\perp}(z)$ são os potenciais de confinamento no plano $x$-$y$ e na direção $z$ respectivamente. O potencial de confinamento no plano $x$-$y$ é a combinação de dois potenciais parabólicos, um em cada direção, dados por

$$V_{\parallel}(x,y) = \frac{1}{2}m^{*}\Omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2}m^{*}\Omega_y^2 y^2, \tag{1.2}$$

onde $m^*$ é a massa efetiva do elétron na banda de condução no semicondutor e as freqüências de confinamento possuem entre si a relação $\Omega_y = \sigma\Omega_x$ sendo $\sigma$ uma constante. O potencial $V_{\perp}(z)$ é considerado como sendo um poço simples finito ou dois poços acoplados correspondendo um ponto quântico simples (SQD) ou dois pontos quânticos acoplados (CQD), respectivamente.

O Hamiltoniano de um elétron, dentro da aproximação de massa efetiva, confinado em um ponto quântico pode ser escrito da seguinte forma

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m^*} + V_{\parallel}(x,y) + V_{\perp}(z) \tag{1.3}$$

onde $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ é o momento tridimensional do elétron. Os níveis de energia e funções de onda do sistema considerado são dados por

$$E_{n_x,n_y,l} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega_y + E_l, \tag{1.4}$$

e

$$\Psi_{n_x,n_y,l}(x,y,z) = \psi_{n_x}(x)\,\psi_{n_y}(y)\,Z_l(z), \tag{1.5}$$

respectivamente, onde

$$\begin{aligned} \psi_{n_x}(x) &= \left(\frac{\gamma_x}{2^{n_x}\sqrt{\pi}n_x!}\right)^{1/2} e^{-\gamma_x^2 x^2/2} H_{n_x}(\gamma_x x), \text{ e} \\ \psi_{n_y}(y) &= \left(\frac{\gamma_y}{2^{n_y}\sqrt{\pi}n_y!}\right)^{1/2} e^{-\gamma_y^2 y^2/2} H_{n_y}(\gamma_y y), \end{aligned} \tag{1.6}$$

com $n_x, n_y = 0, 1, 2, \ldots$ , $\gamma_x = \sqrt{(m^*\Omega_x)/\hbar}$, $\gamma_y = \sqrt{(m^*\Omega_y)/\hbar}$. $H_n(x)$ são os polinômios de Hermite. As energias $E_l$ (com $l = 0, 1, 2, \ldots$) são os níveis de energia devido ao confinamento na direção $z$ e com a função de onda $Z_l(z)$.

Quando $\Omega_y = \Omega_x = \Omega$, ou seja $\sigma = 1$, o potencial de confinamento no plano $x$-$y$ dado pela Eq. (1.2) torna-se igual a

$$V_{\parallel}(x,y) = \frac{1}{2}m^*\Omega^2\left(x^2 + y^2\right). \tag{1.7}$$

Correspondentemente, os níveis de energia são dados por

$$E_{n_x,n_y,l} = (n_x + n_y + 1)\,\hbar\Omega + E_l. \tag{1.8}$$

No Capítulo 2 iremos tratar o espalhamento eletrônico por fônons LA. Neste caso, é mais eficiente utilizarmos coordenadas cilíndricas, especialmente porque consideraremos, em nossos cálculos, um campo magnético externo. Em coordenadas cilíndricas, os níveis de energia e a função de onda são dados por

$$E_{n,m,l} = (2n + |m| + 1)\,\hbar\Omega + E_l \tag{1.9}$$

e

$$\Psi_{n,m,l}(\vec{r}) = \phi_{n,m}(\vec{r}_{\parallel}) Z_l(z) \tag{1.10}$$

com

$$\phi_{n,m}(\vec{r}_{\parallel}) = \left(\frac{\gamma^2 n!}{\pi(n+|m|)!}\right)^{\frac{1}{2}} \rho^{|m|} L_n^{|m|}(\rho^2) e^{-\frac{\rho^2}{2}} e^{im\varphi}, \tag{1.11}$$

que é parametrizada pelo número quântico radial $n = 0, 1, 2, ...$ e o número quântico angular $m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ . Na equação acima, $L_n^m(x)$ são os polinômios de Laguerre, $\gamma = \sqrt{m^* \Omega/\hbar}$, $\vec{r}_{\parallel} = \gamma\rho(\cos\varphi, \sin\varphi)$ e $\rho$ é adimensional.

Estudaremos duas estruturas bem específicas. Um ponto quântico simples, com confinamento parabólico no plano $x$-$y$ e um potencial de um poço quântico finito na direção $z$ e um duplo ponto quântico (dois pontos quânticos acoplados), com um confinamento também parabólico no plano $x$-$y$ e um potencial de dois poços quânticos finitos acoplados.

Considerando o potencial em $z$ para o ponto quântico simples como sendo igual a um poço de potencial quadrado finito na direção z, cuja expressão é [63]

$$V_{\perp}(z) = \begin{cases} 0, & \text{para } |z| \leq W/2 \\ V_0, & \text{para } |z| > W/2 \end{cases} \tag{1.12}$$

onde $W$ é a largura do poço. $E_l$ é determinada pela equação

$$\tan\left(\frac{W}{2}\frac{\sqrt{2m^* E_l}}{\hbar}\right) = \left(\frac{V_0 - E_l}{E}\right)^{1/2},$$

Para um ponto quântico simples, consideramos que o confinamento na direção $z$ é muito mais forte que o no plano $x$-$y$. A função de onda do elétron confinado no poço finito é

$$Z_l(z) = \begin{cases} B_0 \cos(kz), & \text{para } |z| \leq W/2 \\ B_0 \cos(kW/2) e^{-k_1(|z|-W/2)}, & \text{para } |z| > W/2 \end{cases} \tag{1.13}$$

onde $k = \sqrt{2m^* E_0}/\hbar$, $k_1 = \sqrt{2m^*(V_0 - E_0)}/\hbar$, e a constante de normalização $B_0$ é dada por

$$B_0 = \left(\frac{2k}{kW + \sin(kW) + 2k\cos^2(kW/2)/k_1}\right)^{1/2}. \tag{1.14}$$

Como o ponto quântico simples tem propriedades de um átomo, os dois pontos acoplados terão propriedades de uma molécula, assim estudaremos algumas características da molécula artificial. O potencial de confinamento de um duplo poço quântico é dado pela expressão

$$V_{\perp}(z) = \begin{cases} 0, & \text{para } |z + \frac{1}{2}(W_1 + W_B)| < \frac{1}{2}W_1 \text{ ou } |z - \frac{1}{2}(W_2 + W_B)| < \frac{1}{2}W_2 \\ V_0, & \text{para } |z + \frac{1}{2}(W_1 + W_B)| > \frac{1}{2}W_1 \text{ ou } |z - \frac{1}{2}(W_2 + W_B)| > \frac{1}{2}W_2 \end{cases} \tag{1.15}$$

que acopla dois poços de potencial quadrado separados por uma barreira de largura definida $W_B$ e a largura dos poços é $W_1$ e $W_2$.

Devido a complexidade da função de onda do elétron confinado num duplo poço quântico, nós realizamos nossos cálculos numericamente. Na Fig. (1.1) mostramos algumas funções de onda para o estado fundamental e o primeiro estado excitado no duplo poço. Escolhemos algumas larguras do segundo poço $W_2$ mantendo fixa largura do poço $W_1$ em 100 Å. Com uma barreira de 30 Å variamos a largura do poço $W_2$ em quatro valores: 50 Å, 80 Å, 100 Å e 150 Å. A função de onda do elétron depende da largura dos poços e da largura da barreira.

Fizemos gráficos para quatro níveis do elétron confinado no duplo ponto quântico. Dois níveis de confinamento bidimensional, no plano xy e dois no duplo poço quântico. A estrutura de níveis de energia em função da largura de um dos poços é mostrada na Fig. (1.2) no caso onde um dos poços possui uma largura fixa igual a 100 Å e a barreira igual a 60 Å, nesta figura o confinamento parabólico em x e y é $\Omega/\omega_{LO} = 1.0$. Para uma barreira de 30 Å com o poço $W_1 = 100$ Å e confinamento $\Omega/\omega_{LO} = 1.0$ temos a Fig. (1.3). Os quatro níveis considerados apresentam cruzamentos das linhas de energia para determinados valores de $W_2$. Os dois gráficos mostram o anticrossing dos dois primeiros níveis de energia $(0,0,0)$ e $(0,0,1)$ assim como o dos dois próximos níveis $(1,0,0)$ e $(1,0,1)$ exatamente quando os poços possuem a mesma largura.

Como foi dito, o confinamento tridimensional do elétron no ponto quântico promove níveis discretos de energia para o elétron semelhante a um átomo. Assim muitas propriedades

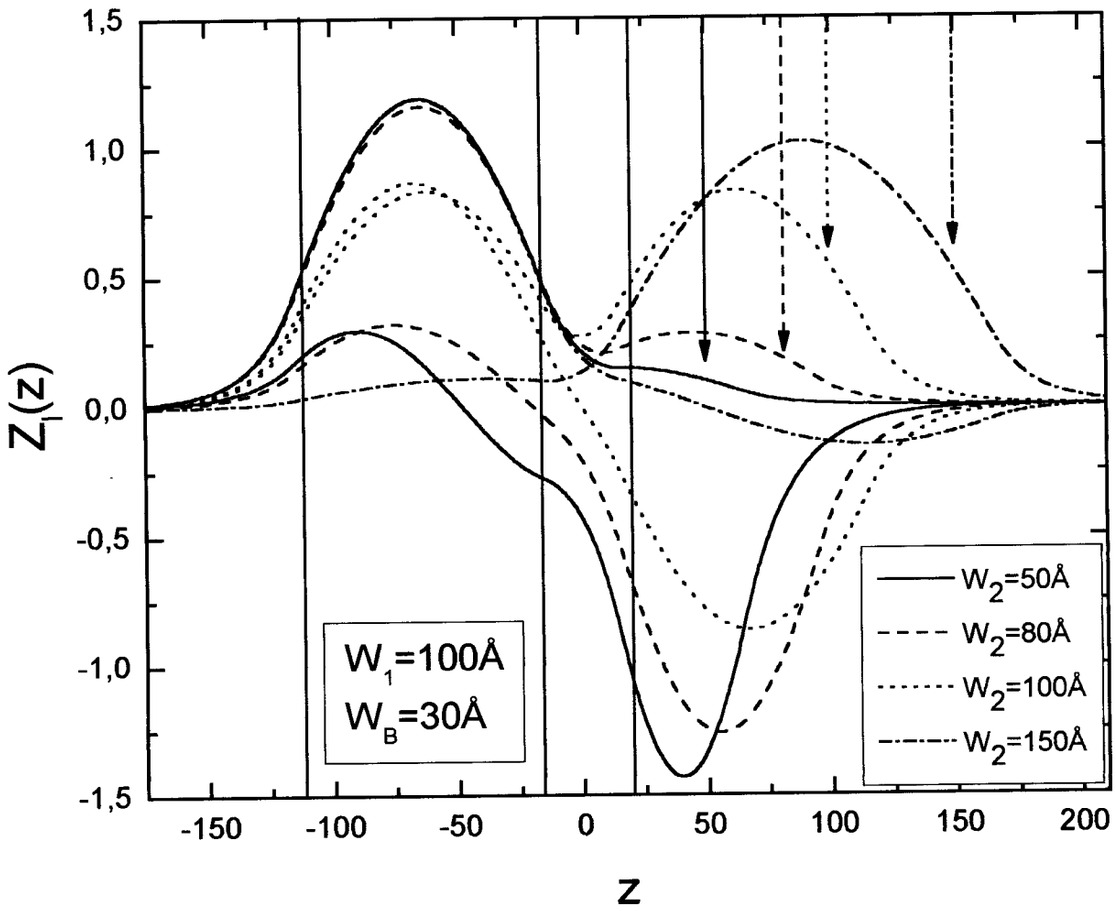


Figura 1.1: Funções de onda do elétron confinado em duplo poço quântico retangular e finito para vários valores da largura de um dos poços mantendo fixa em 100Å a largura do outro poço. O valor da barreira é de 30 Å.

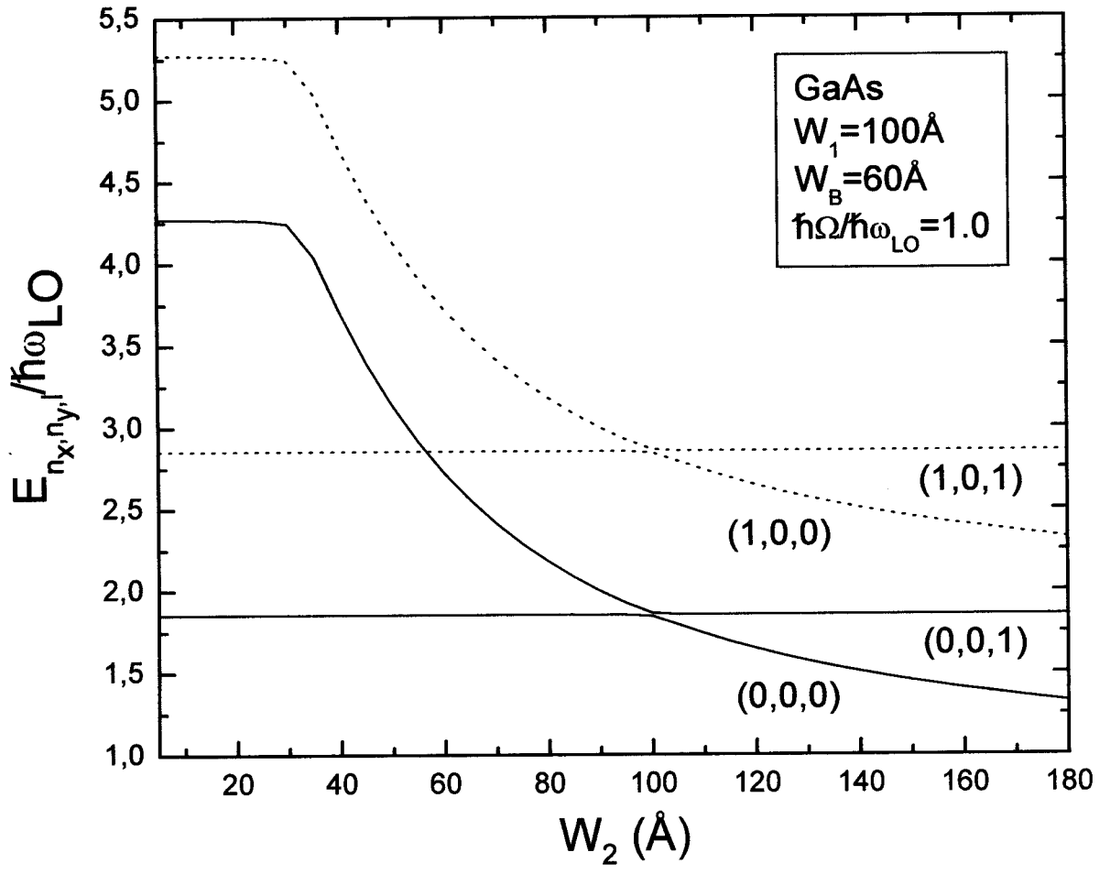


Figura 1.2: Estrutura de níveis de energia em função da largura de um do poço $W_2$. $W_1 = 100$Å e $W_B = 60$ Å. O confinamento parabólico em x e y é $\Omega/\omega_{LO} = 1.0$.

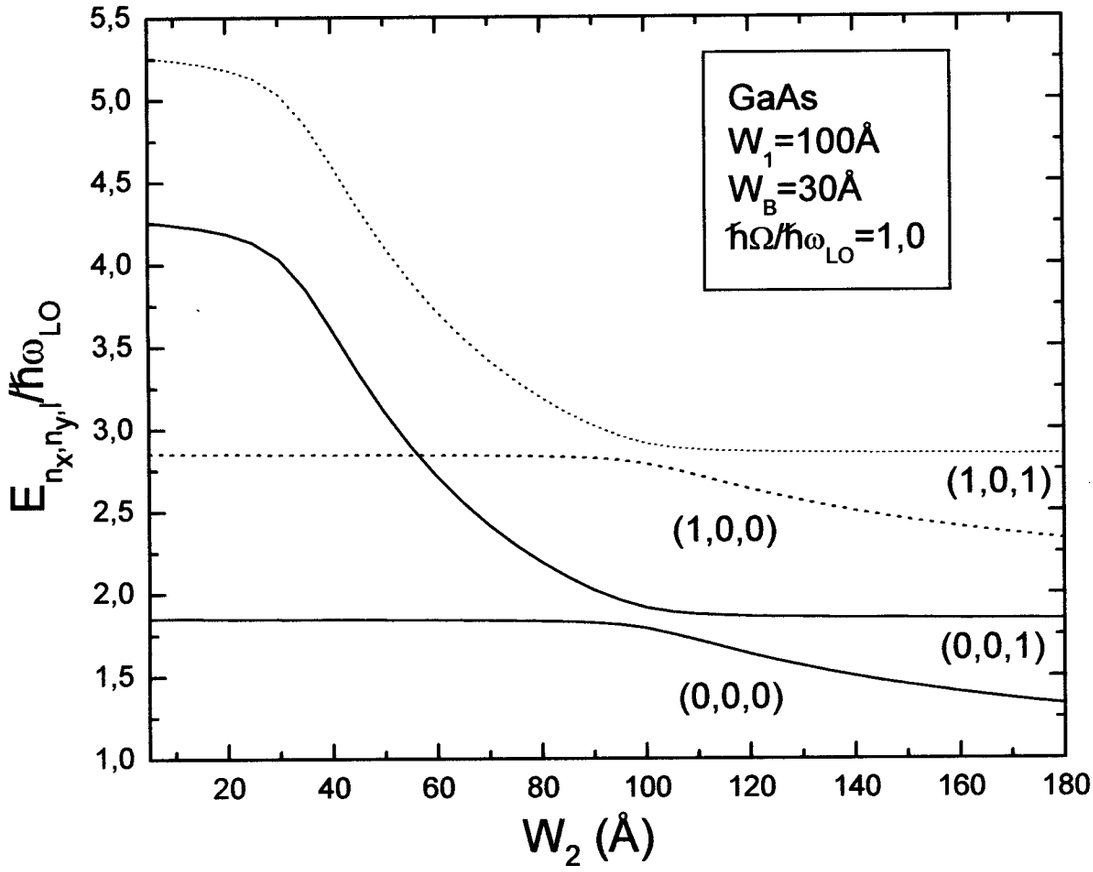


Figura 1.3: Estrutura de níveis de energia em função da largura de um do poço $W_2$. $W_1 = 100$Å e $W_B = 30$ Å. O confinamento parabólico em x e y é $\Omega/\omega_{LO} = 1.0$.

dos pontos quânticos são parecidas com propriedades de átomos. A densidade de estados do elétron em um ponto quântico é representada por funções delta localizadas nos valores de energia de cada nível quântico. Para um ponto quântico a densidade de estados em termos da energia dos níves pode ser representado por [1]

$$A_i(E) = \delta\left(E - E_i\right). \tag{1.16}$$

Estudaremos a densidade de estados do elétron acoplados com os fônons longitudinais ópticos do sistema, ou seja, o polaron. Conhecendo a densidade de estados do elétron no ponto quântico analizaremos os efeitos promovidos por essa interação.

## 1.3 Interação elétron-fônon

A interação elétron-fônon é considerada apenas com os fônons do material bulk. A presença de fônons das heterointerfaces ao longo da direção de crescimento e eventualemente ao longo da direção lateral é desprezada [64], [65]. Isto se baseia no fato de que os íons são muito mais pesados que os elétrons, e portanto, energias de confinamento quântico dos fônons são fracas comparadas as do elétron. A aproximação de fônon do bulk é muito boa para sistemas de baixa-dimensionalidade.

O Hamiltoniano de um elétron interagindo com o sistema de fônons tridimensionais do bulk, pode ser escrito da seguinte maneira

$$H_{e-f} = \sum_{\vec{q}} V\left(q\right)\left(b_{\vec{q}}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} + b^{\dagger}_{-\vec{q}}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\right) \tag{1.17}$$

onde $b_{\vec{q}}$ e $b^{\dagger}_{-\vec{q}}$ são os operadores de destruição e criação de fônons respectivamente, $\vec{r}$ é o vetor posição do elétron, $\vec{q}$ denota o vetor de onda dos fônons e o termo $V(q)$ é o potencial da interação elétron-fônon, cuja expressão para os modos de fônons longitudinais ópticos (LO) [66] é

$$V\left(q\right) = \hbar\omega_{LO}\left(\frac{\hbar}{2m^{*}\omega_{LO}}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{4\pi\alpha}{q^2 V_{ol}}}, \tag{1.18}$$

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

onde $\hbar\omega_{LO}$ é a energia do fônon LO, $V_{ol}$ é o volume do material semicondutor e $\alpha$ é a constante de acoplamento da interação elétron-fônon LO, ou simplesmente constante de Fröhlich, sendo dada pela seguinte expressão

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar}\left(\frac{m^*}{2\hbar\omega_{LO}}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right). \tag{1.19}$$

com $e$ a carga do elétron, $\varepsilon_0$ e $\varepsilon_\infty$ as constantes dielétricas. Os modos de fônons LO possuem uma relação de dispersão praticamente constante igual a $\omega_{LO}$. Para os modos de fônons longitudinais acústicos (LA) o termo (1.18) é dado por

$$V(q) = D\sqrt{\frac{\hbar q}{2\rho_s v_s V_{ol}}}, \tag{1.20}$$

onde $D$ é o potencial de deformação acústico, $\rho_s$ a densidade do material e $v_s$ é a velocidade do som. A relação de dispersão para os fônons LA é considerando isotrópica $\omega_q = v_s q$.

O Hamiltoniano da interação elétron fônon LO, o Hamiltoniano de Fröhlich, descreve a interação do elétron com um campo de polarização macroscópico médio originado por uma polarização que o mesmo elétron cria. Durante a dedução deste Hamiltoniano obtém-se que as oscilações transversais não sentem a presença do elétron, isto se deve principalmente ao fato de que os fenômenos de indução são desprezados devido às baixas velocidades dos íons e dos elétrons. Disto podemos concluir que apenas as contribuições longitudinais participam na interação.

Em nossos cálculos estamos usando o Hamiltoniano para fônons volumétricos (bulk) e inserimos as propriedades de um ponto quântico quando usamos a função de onda para calcular o elemento de matriz da interação elétron-fônon.

## 1.4 Elemento de matriz da interação elétron-fônon

O acoplamento do elétron com os fônons é medido pelo elemento de matriz da interação elétron -fônon, dado por

$$M_{ij} = V(q) \langle i| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |j\rangle = V(q) \langle n_x n_y l| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |n'_x n'_y l'\rangle . \tag{1.21}$$

Podemos escrever o elemento de matriz da interação da seguinte forma

$$M_{\substack{n_x n_y l \\ n'_x n'_y l'}} = \langle n_x| e^{iq_x x} |n'_x\rangle \langle n_y| e^{iq_y y} |n'_y\rangle \langle l| e^{iq_z z} |l'\rangle .$$

Utilizaremos nos capítulos 3 e 4 o elemento de matriz da interação elétron-fônon calculado a partir da função de onda em coordenadas cartesianas. Abaixo apresentamos as expressões analíticas para as integrais em $x$ e em $y$. Para isso utilizamos $\gamma_x$ e $\gamma_y$ para adimensionalizar as quantidades $x$, $y$ e $q$ da equação acima.

Para a integral em $x$ temos a seguinte transformação de variáveis $\gamma_x x = \varepsilon$ e $d\varepsilon = \gamma_x dx$ que nos leva a

$$\langle n_x| e^{iq_x x} |n'_x\rangle = \left(\frac{\gamma_x}{2^{n_x}\sqrt{\pi} n_x!}\right)^{1/2} \left(\frac{\gamma_x}{2^{n'_x}\sqrt{\pi} n'_x!}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\varepsilon^2} e^{iq_x \frac{\varepsilon}{\gamma_x}} H^*_{n_x}(\varepsilon) H_{n'_x}(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{\gamma_x}$$

Que depois de alguns cálculos fica

$$\langle n_x| e^{iq_x x} |n'_x\rangle = e^{-\frac{q_1^2}{4}} \left(\frac{1}{\pi 2^{n_x} n_x! 2^{n'_x} n'_x!}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\varepsilon - \frac{iq_1}{2}\right)^2} H^*_{n_x}(\varepsilon) H_{n'_x}(\varepsilon) d\varepsilon.$$

onde $q_1 = q_x/\gamma_x$.

Resolvendo a integral ficamos com

$$M_{n_x n'_x}(q_1) = \langle n_x| e^{iq_x x} |n'_x\rangle = \frac{e^{-\frac{q_1^2}{4}}}{(2^{n_x} n_x! 2^{n'_x} n'_x!)^{\frac{1}{2}}} \times \begin{cases} 2^{n'_x} n_x! \left(\frac{iq_1}{2}\right)^{n'_x - n_x} L_{n'_x}^{n'_x - n_x}\left(\frac{q_1^2}{2}\right), & n'_x \geq n_x \\ 2^{n_x} n'_x! \left(\frac{iq_1}{2}\right)^{n_x - n'_x} L_{n_x}^{n_x - n'_x}\left(\frac{q_1^2}{2}\right), & n_x \geq n'_x \end{cases} . \tag{1.22}$$

Da mesma forma temos o resultado para a parte em $y$

$$M_{n_y n'_y}(q_2) = \langle n_y| e^{iq_y y} |n'_y\rangle = \frac{e^{-\frac{q_2^2}{4}}}{\left(2^{n_y} n_y! 2^{n'_y} n'_y!\right)^{\frac{1}{2}}} \times \begin{cases} 2^{n'_y} n_y! \left(\frac{iq_2}{2}\right)^{n'_y - n_y} L_{n'_y}^{n'_y - n_y}\left(\frac{q_2^2}{2}\right), & n'_y \geq n_y \\ 2^{n_y} n'_y! \left(\frac{iq_2}{2}\right)^{n_y - n'_y} L_{n_y}^{n_y - n'_y}\left(\frac{q_2^2}{2}\right), & n_y \geq n'_y \end{cases}. \tag{1.23}$$

com $q_2 = q_y/\gamma_y$. Para o caso onde o confinamento $\Omega_y = \Omega_x = \Omega$ a equação acima torna-se mais simples, trocam-se apenas as constantes $\gamma_x$ e $\gamma_y$ por $\gamma$.

E para a parte em $z$ temos

$$M_{l,l'}(q_z) = \langle l| e^{iq_z z} |l'\rangle = \int Z_l^*(z)\, e^{iq_z z} Z_{l'}(z)\, dz. \tag{1.24}$$

Para a direção $z$, como foi dito, utilizaremos um potencial de um poço quântico finito. A partir das expressões (1.21) podemos calcular o elemento de matriz da interação elétron fônon LO e utilizá-lo para determinar os efeitos deste acoplamento para a densidade de estados e auto-energia.

# Capítulo 2

# Espalhamento por fônon LA e relaxação dos elétrons

## 2.1 Introdução

Neste trabalho, apresentamos cálculos detalhados das taxas de espalhamento de elétrons devido aos fônons LA e processos de relaxação do elétron em pontos quânticos simples e acoplados na ausência e na presença de campos magnético e elétrico externos. Na ausência de um campo externamente aplicado, a interação acopla à largura efetiva do confinamento em diferentes direções bem como o comprimento de onda do fônon, levam a uma forte oscilação da taxa de espalhamento dos fônons LA entre dois níveis eletrônicos. O espalhamento depende fortemente da geometria e do potencial de confinamento do ponto quântico. Um campo magnético externo também modula fortemente a taxa de espalhamento em várias ordens de magnitude. Os efeitos induzidos pelo campo magnético são muito parecidos nos casos de um ponto quântico e dois pontos quânticos acoplados onde a intensidade do confinamento efetivo na direção $z$ afeta intensamente a taxa de espalhamento como discutido na referência [55]. Entretanto, observamos que um múltiplo processo de relaxação desempenha um papel essencial para a relaxação do elétron de estados excitados para o estado fundamental em pontos quânticos simples e acoplados. Quando incluimos todos os canais de relaxação possíveis, observamos que

um campo magnético externo não suprime o tempo de relaxação. Pelo contrário, o campo aumenta a relaxação através de transições indiretas.

## 2.2 Elétron confinado num ponto quântico em um campo magnético

Consideramos um ponto quântico composto de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ onde 0.7 é a concentração de $Ga$ e 0.3 a concentração de $Al$. O confinamento lateral possui um perfil parabólico isotrópico com freqüência de confinamento $\Omega$, como discutido no Capítulo 1. Na ausência de campos externos, os níveis de energia do elétron no ponto quântico são dados em coordenadas cilíndricas pela equação (1.9): $E_{nml} = (2n + |m| + 1)\,\hbar\Omega + E_l$.

Quando um campo magnético externo é aplicado ao ponto quântico na direção $z$, o Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = -\frac{\left(\vec{p} + e\vec{A}\right)^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\Omega^2 r_{\parallel}^2 + V_{\perp}(z)\,, \tag{2.1}$$

onde $\vec{r}_{\parallel} = (r_{\parallel}, \varphi)$ em coordenadas cilíndricas e $\vec{A}$ é o potencial vetor do campo magnético. Os estados do elétron são descritos pelas auto-energias

$$E_{nml} = (2n + |m| + 1)\,\hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega_c m + E_l, \tag{2.2}$$

e as funções de onda são $\Psi_{nml}(\mathbf{r}) = \phi_{nm}(\vec{r}_{\parallel})Z_l(z)$, com

$$\phi_{n,m}(\vec{r}_{\parallel}) = \left(\frac{m^*\omega n!}{\pi\hbar(n + |m|)!}\right)^{\frac{1}{2}} \rho^{|m|} L_n^{|m|}\left(\rho^2\right) e^{-\frac{\rho^2}{2}} e^{im\varphi}, \tag{2.3}$$

onde $n = 0, 1, 2..., m = 0, \pm1, \pm2, ... \pm n,\ \ l = 0, 1, ...,\ \ \omega_c = eB/m^*$ é a freqüência ciclotrônica, $\omega = \sqrt{\Omega^2 + \omega_c^2/4}$, $\rho = \gamma r_{\parallel}$ e $\gamma = \sqrt{m^*\omega/\hbar}$.

Para um ponto quântico simples, o confinamento na direção $z$ é usualmente muito mais forte que na direção lateral. Estudaremos, neste caso, apenas os níveis com $l = 0$. Assim os

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

estados do elétron podem ser indicados por dois índices $(n, m)$. O estado fundamental é $(0, 0)$ e o primeiro estado excitado é $(0, -1)$. Para dois pontos quânticos acoplados e simétricos, exite o estado simétrico ($l = 0$) e o estado antisimétrico ($l = 1$) na direção $z$, cujas energias podem ser muito próximas dependendo do tunelamento entre eles. Quando o tunelamento é forte, ou seja, a diferença de energia do nível simétrico e do antisimético é $\Delta_{SAS} > \hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega_c$, o primeiro estado excitado é $(n, m, l) = (0, -1, 0)$. Quando $\Delta_{SAS} < \hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega_c$, o primeiro estado excitado torna-se $(n, m, l) = (0, 0, 1)$. Os níveis de energia $E_{n,m,l} - E_l = E_{n,m} = (2n + |m| + 1)\,\hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega_c m$ do elétron associados ao nível de energia $E_l$ são plotados em função do campo magnético na Fig. 2.1. Para campo magnético nulo os estados com $+m$ e $-m$ são degenerados. A degenerescência dos estados com energia $j\hbar\Omega + E_l$ é $j$ (onde $j = 1, 2, 3, ...$). Para altos campos magnéticos ($\omega_c >> 2\Omega$), os níveis de energia convergem para o nível de Landau bi-dimensional $E_N = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$ com $N = n + m\ \theta(m)$, onde $\theta(x)$ é a "step function".

## 2.3 Taxa de espalhamento elétron-fônon LA

Calculamos nesta seção a taxa de espalhamento elétron-fônon LA entre dois níveis específicos do elétron no ponto quântico. Baseado nos resultados obtidos, vamos estudar o processo de relaxação de um elétron do estado excitado para o estado fundamental. O Hamiltoniano da interação elétron-fônon foi apresentado na equação (1.17) no capítulo anterior, com o potencial da interação elétron-fônon LA dado por (1.20).

Considerando-se a interação com os fônons LA, a taxa de espalhamento do fônon, em uma dada temperatura $T$, é calculada a partir da regra de outro de Fermi [68]

$$\tau_{i\to f}^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{\mathbf{q}} |M_{if}(\vec{q})|^2\, \delta\left(E_f - E_i + \lambda\hbar\omega_q\right) \left[n_B(\omega_q, T) + \frac{1}{2} + \lambda\frac{1}{2}\right] \tag{2.4}$$

onde $\lambda = +1$ $(-1)$ corresponde a emissão (absorção) de um fônon LA, $M_{if}(\vec{q}) = \langle i|\, H_{e-f}\, |f\rangle$ é o elemento de matriz da interação elétron-fônon, $n_B(\omega_q, T)$ é a função de distribuição de

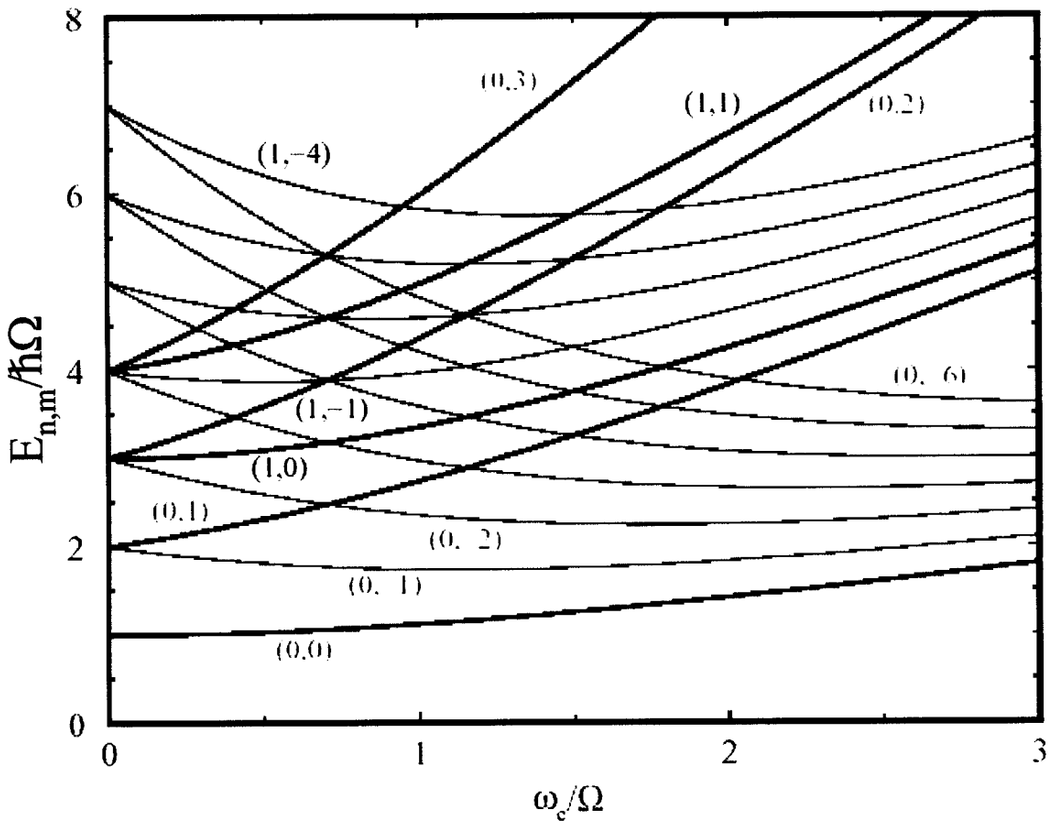


Figura 2.1: Níveis de energia $E_{n,m}$ como uma função do campo magnético em um ponto quântico.

Bose-Einstein.

Neste trabalho, estamos interessados no espalhamento elétron-fônon LA para baixas temperaturas e no tempo de relaxação de um elétron de um estado excitado para o estado fundamental. Para $T = 0$, a taxa de espalhamento entre dois níveis torna-se

$$\tau_{i\to f}^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q |M_{if}(\vec{q})|^2 \, \delta\left(E_f - E_i + \hbar\omega_q\right), \tag{2.5}$$

onde apenas a emissão de fônon acontece durante o espalhamento. Usando a equação (1.21), obtemos a taxa de espalhamento do estado inicial $(n, m, l)$ para o estado final $(n', m', l')$

$$\tau_{(nml)\to(n'm'l')}^{-1} = \frac{D^2 q_0^3}{2\pi\rho_s \hbar v_s^2} \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta \; | \, G_{nm,n'm'}(q_0 \sin\theta)|^2 \; |G_{l,l'}(q_0 \cos\theta, W)|^2, \tag{2.6}$$

onde $q_0 = q_{nml}^{n'm'l'} = (E_{nml} - E_{n'm'l'})/\hbar v_s$. Chamamos a atenção para o fato que a energia do estado inicial (ocupado) é maior que a do estado final (desocupado). Nos cálculos, usamos os parâmetros $D = 8,6\ eV$, $\rho_s = 5300\ kg/m^3$ e $v_s = 3700\ m/s$ para o GaAs.

O elemento de matriz $G_{nm;n'm'}(q_0 \sin\theta) = \langle \phi_{n'm'} | \, e^{-iq_0 r_{\parallel} \sin\theta} \, | \phi_{nm} \rangle$ na Eq. (2.6) é dada por

$$G_{nm;n'm'}(q_{\parallel}) = 2\left[\frac{n!n'!}{(n+|m|)!(n'+|m'|)!}\right]^{1/2} e^{-i(m-m')(\varphi-\pi/2)} \times \tag{2.7}$$

$$\times \int_0^{\infty} d\rho \rho^{|m|+|m'|+1} L_n^{|m|}(\rho^2) L_{n'}^{|m'|}(\rho^2) e^{-\rho^2} J_{m-m'}(Q\rho) \tag{2.8}$$

onde $Q = (q/\gamma)\sin\theta$. Para um ponto quântico simples (SQD), o elemento de matriz $G_{l,l'}(q_0 \cos\theta, W)$ $\langle Z_{l'} | \, e^{iq_0 z \cos\theta} \, | Z_l \rangle$ na direção $z$ para o potencial de confinamento dado pela equação (1.12) é

$$\begin{aligned} G_{0,0}(q_z, W) &= B_0^2 \left( \cos^2(kW/2) \frac{2k_1 \cos(q_z W/2) - q_z \sin(q_z W/2)}{2(2k - q_z)} \right. \\ &\left. + \frac{\sin\left[(2k - q_z)W/2\right]}{2(2k - q_z)} + \frac{\sin\left[(2k + q_z)W/2\right]}{2(2k + q_z)} + \frac{\sin\left[q_z W/2\right]}{q_z} \right). \end{aligned} \tag{2.9}$$

Para dois pontos quânticos acoplados (CQDs) com mesma largura $W_1 = W_2 = W$, uma ex-

pressão analítica para o elemento de matriz $G_{0,0}(q_0 \cos\theta, W)$ é possível mas é complexa. Preferimos usar cálculos numéricos diretamente.

Quando um elétron é injetado em um estado excitado do ponto quântico, ele relaxa em seguida para o estado fundamental. O tempo de relaxação $\tau_R$ é de fundamental importância para o entendimento das propriedades físicas relacionadas ao sistema e também para a aplicação em dispositivos optoeletrônicos. O mecanismo de relaxação mais eficiente neste sistema é a interação elétron-fônon LA. O elétron relaxa de um estado de energia mais alta para um estado de energia mais baixa emitindo fônons LA. Para o elétron no primeiro estado excitado, este tempo de relaxação é dado pela equação (2.6) que é a taxa de espalhamento entre os dois estados. Entretanto, para elétrons no segundo estado excitado ou mais altos, existem diferentes canais de relaxação. Mostraremos neste capítulo, que a relaxação do elétron é sempre dominada pelos processos de relaxação de multicanais.

## 2.4 Resultados numéricos

### 2.4.1 Um ponto quântico

Primeiramente, vamos estudar o espalhamento do elétron num ponto quântico na ausência de qualquer campo externo. A taxa de espalhamento entre dois estados específicos é apresentada na Fig. 2.2(a) em uma função da freqüência de confinamento $\Omega$ para um ponto quântico com largura $W = 50$ Å. A oscilação da taxa de espalhamento é um resultado da interação do elemento de matriz de espalhamento no plano $x$-$y$ e na direção $z$ levando a um diferente ângulo de espalhamento elétron-fônon LA. O gráfico mostra que a taxa de espalhamento é uma função que oscila com $\hbar\Omega$. A taxa de espalhamento primeiramente aumenta com o confinamento lateral $\Omega$, adquire um máximo e decai rapidamente quando $\Omega$ aumenta. Para pequenos valores de $\Omega$, o aumento da taxa de espalhamento é causado pela dependência do potencial de interação

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

elétron-fônon LA com o vetor de onda $q$ dos fônons. Para altos valores de $\Omega$ o comprimento de onda do fônon torna-se menor do que a menor dimensão do ponto quântico e a taxa de espalhamento diminui rapidamente. A taxa de espalhamento é essencialmente determinada pela diferença de energia entre os dois níveis envolvidos que determinam o vetor de onda de espalhamento $q_0$. Se nós plotarmos a taxa de espalhamento $\tau^{-1}_{(nml)\to(n'm'l')}$ como uma função de $q_0 = q^{n'm'l'}_{nml}$, os mínimos e os máximos desta taxa de espalhamento entre qualquer dois níveis acontecem nos mesmos valores de $q_0$. Além disso, os máximos da taxa de espalhamento entre quaisquer dois níveis são da mesma ordem de grandeza.

As taxas de espalhamento por fônon LA são influenciadas pela largura do ponto quântico na direção $z$. Para mostrar isto nós mapeamos a taxa de espalhamento do estado $(0, \pm 1)$ para o estado $(0, 0)$ no plano $\Omega$-$W$ como mostrado na Fig. 2.2(b). Nós observamos que num ponto quântico largo com um $W$ maior, a taxa de espalhamento pode ser substancialmente reduzida. As cores na Fig. 2.2 (b) indicam o seguinte: o vermelho apresenta um valor maior da taxa de espalhamento e a medida que ela diminui a cor tende para o preto.

Um campo magnético externo na direção $z$ modula os estados do elétron e, consequentemente, a taxa de espalhamento. A Fig. 2.3 mostra a taxa de espalhamento dos estados excitados (a) $(0, +1)$ e (b) $(0, -1)$ para o estado fundamental $(0, 0)$ como uma função do campo magnético em pontos quânticos com diferentes valores de $W$. O campo magnético remove a degenerescência do estado $m = \pm 1$ como mostrado na Fig. 2.1. O estado $(0, -1)$ é o primeiro estado excitado no campo magnético. Aumentando o campo magnético, a diferença de energia entre o estado $(0, -1)$ $[(0, +1)]$ e o estado fundamental $(0, 0)$ diminui [aumenta] levando, consequentemente, a um aumento [diminuição] na taxa de espalhamento. Queremos ainda mencionar que a taxa de espalhamento elétron-fônon LA é muito sensível ao potencial de confinamento na direção $z$. As curvas tracejadas são as taxas de espalhamento obtidas para uma barreira

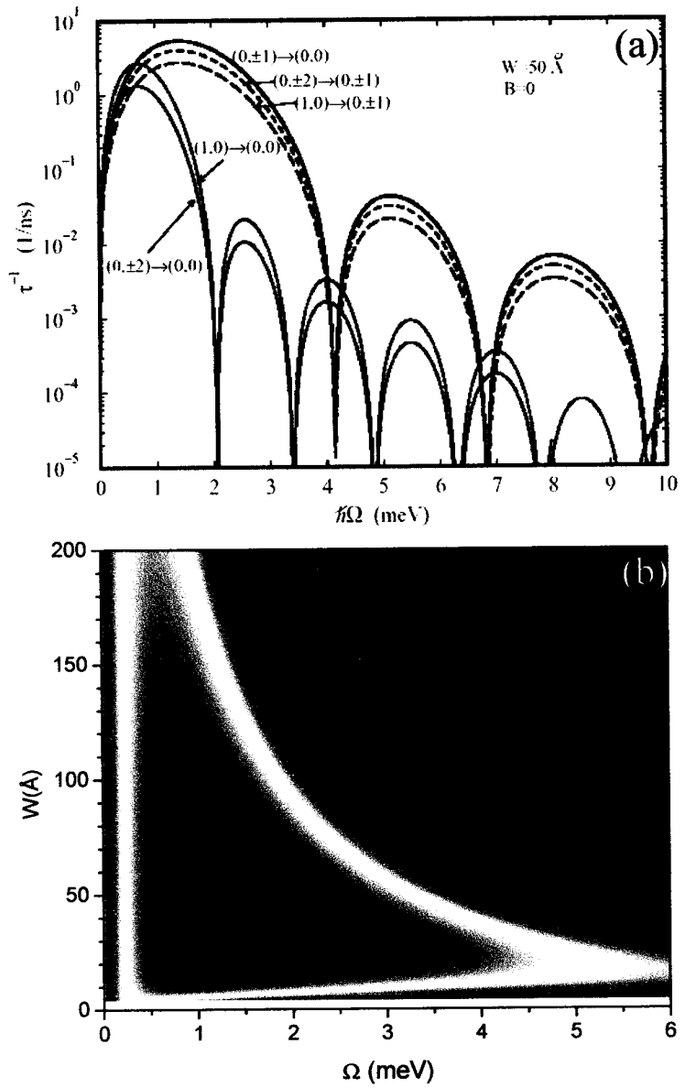


Figura 2.2: (a) Taxa de espalhamento entre diferentes estados como uma função da freqüência de confinamento no plano $x$-$y$ num ponto quântico de largura $W = 50$ Å. (b) Mapeamento da taxa de espalhamento do estado $(0, \pm 1)$ para o estado fundamental $(0, 0)$ no plano $\Omega$-$W$.

de potencial infinito ($V_0 \to \infty$) na direção $z$. Vimos que esta forma do potencial aumenta consideravelmente a taxa de espalhamento, especialmente para pequenos valores de $W$. Isto está relacionado ao elemento de matriz $|G_{0,0}(q_0 \cos\theta, W)|^2$ na direção $z$ como uma função do ângulo $\theta$. A barreira infinita na direção $z$ aumenta fortemente este efeito.

Mostramos que a largura $W$ do ponto quântico afeta sensivelmente a taxa de espalhamento na ausência de um campo externo. Fig. 2.3 (c) mostra um contorno da taxa de espalhamento no plano $B$-$W$-$\Delta E$ do estado $(0,-1)$ (esquerda) e o estado $(0,+1)$ (direita) para o estado fundamental $(0,0)$. Fig. 2.3 (c) mostra um gráfico muito parecido com a Fig. 2.2 (b) embora a Fig. 2.3 (c) é um contorno da taxa de espalhamento num campo magnético. Nesta figura mostramos um mapa da taxa de espalhamento num plano que apresenta a largura do ponto quântico, a diferença de energia entre dois níveis e o campo magnético. Podemos observar que a medida que o campo magnético aumenta a taxa de espalhamento diminui para valore altos de largura do ponto quântico e também quando a separação de energia entre dois níveis aumenta.

Devido à dependência não-linear dos níveis de energia com o campo magnético, as taxas de espalhamento entre os diferentes níveis em função do campo magnético tornam-se mais complicadas. Para um melhor entendimento das taxas de espalhamento no campo magnético, calculamos várias destas taxas entre diferentes níveis de energia, os quais são indicados pelo diagrama da Fig. 2.4. Os resultados obtidos são apresentados nas Figs. 2.5(a) e (b) e mostram que a taxa de espalhamento, no caso em que se considera o campo magnético, depende principalmente da diferença de energia entre os níveis envolvidos. Isto fica claro na Fig. 2.5(c), que mostra a taxa de espalhamento apresentada na Fig. 2.5(a) como função da diferença de energia entre os níveis. Para os mesmos valores de $E_{nml} - E_{n'm'l'} (= \hbar v_s q_0)$, as diferenças nas taxas de espalhamento em transições diferentes, que são da mesma ordem de grandeza,

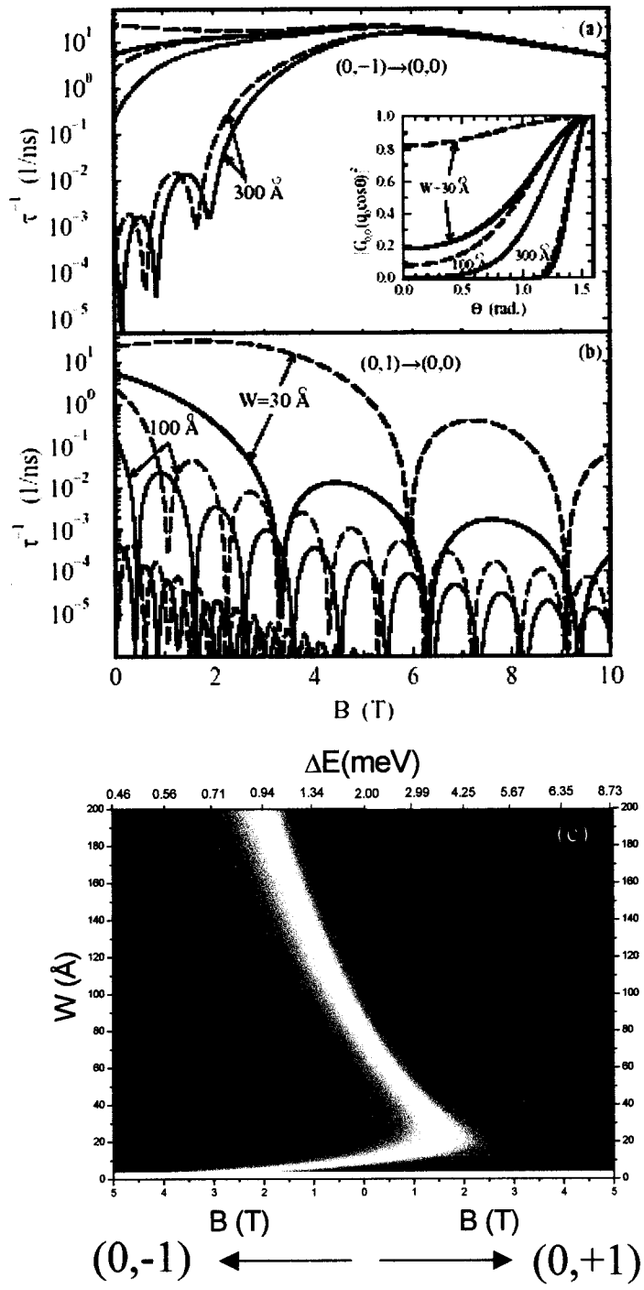


Figura 2.3: Taxa de espalhamento do estado (a) $(0,-1)$ e (b) $(0,1)$ para o estado fundamental $(0,0)$ como uma função do campo magnético para $\Omega = 2$ meV e $W = 30$, 100, e 300 Å. O quadro mostra o elemento de matriz na direção $z$ como uma função de $\theta$. Mapeamento do contorno da taxa de espalhamento dos estados $(0,1)$ e $(0,-1)$ para o estado fundamental $(0,0)$ no plano $B$-$W$ para $\Omega = 2$ meV.

são originadas dos diferentes elementos de matriz da interação elétron-fônon. Assim, podemos entender que a semelhança entre a Fig. 2.2(b) e a Fig. 2.3(c) é devido a essa propriedade da taxa de espalhamento. Queremos enfatizar que a taxa de espalhamento entre outros estados diferentes produz uma figura similar no plano $\Delta E - W$.

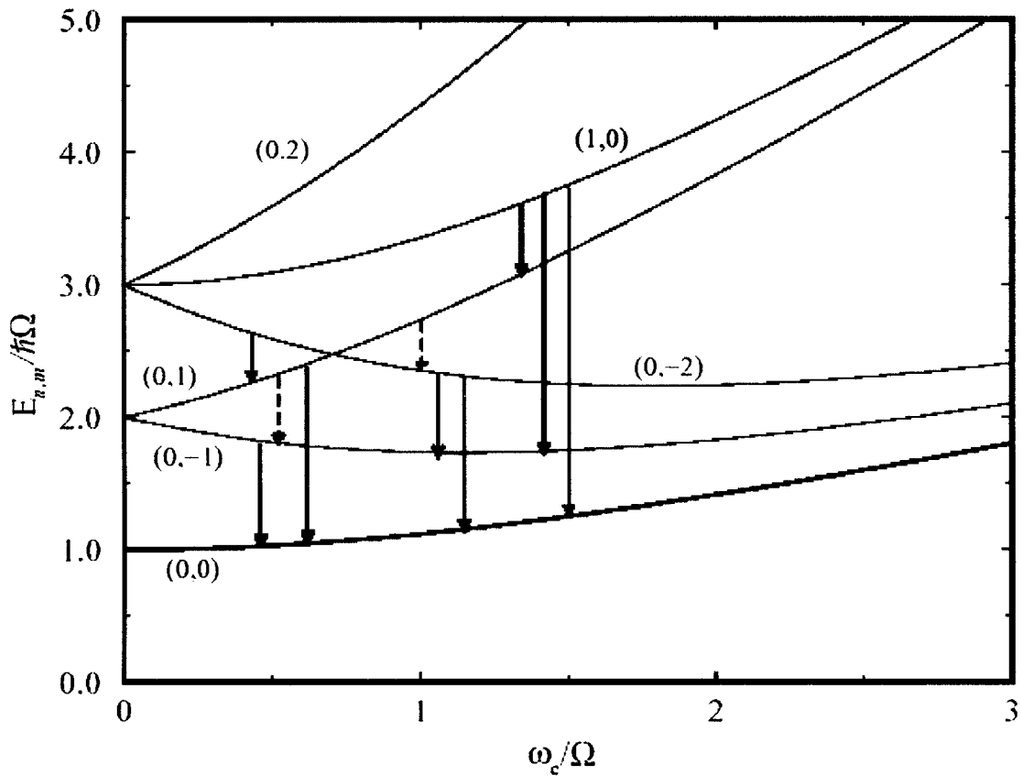


Figura 2.4: Diagrama de transições.

Observando a Fig. 2.5(a) podemos verificar que a taxa de espalhamento entre os estados $(0,-1)$ e $(0,0)$ é a maior até $B = 6.6$ T. Esta taxa determina o tempo de relaxação de um elétron do primeiro estado excitado $(0,-1)$ para o estado fundamental. Para campos magnéticos com $B > 6.6$ T, o espalhamento do estado $(0,-2)$ para $(0,0)$ torna-se o maior

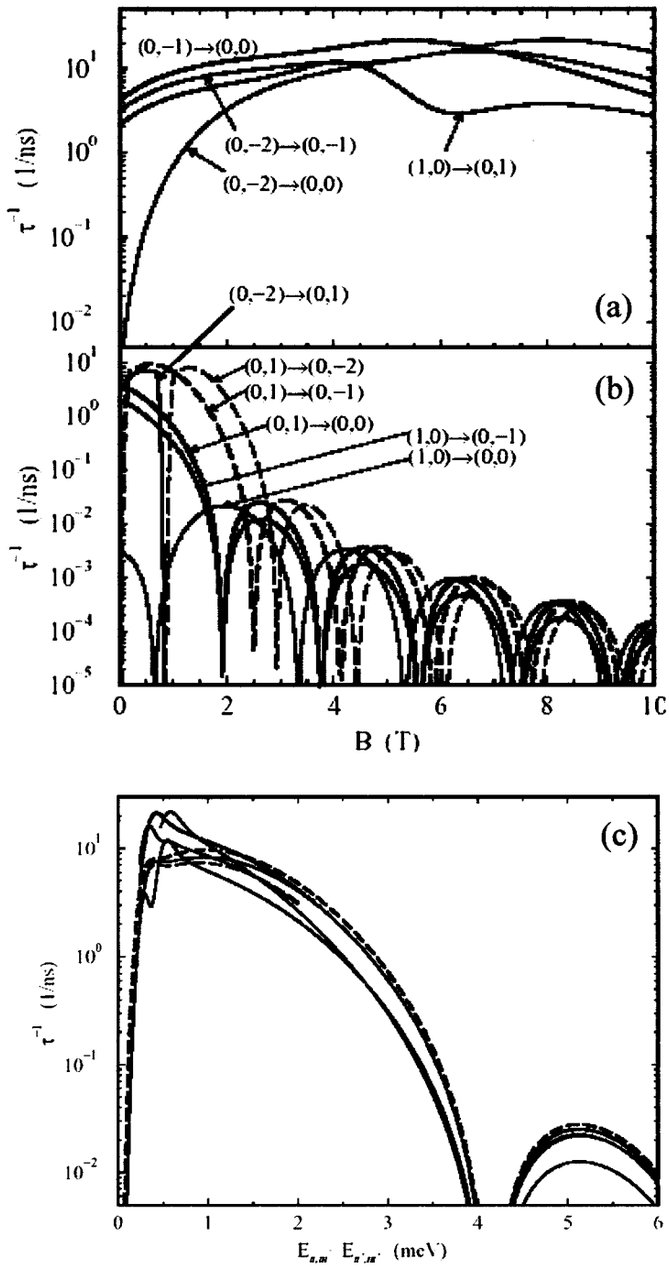


Figura 2.5: (a) e (b) Taxa de espalhamento entre diferentes estados como uma função do campo magnético em pontos quânticos com $\Omega = 2$ meV e $W = 50$ Å. (c) Taxa de espalhamento da Fig. 2.5(a) é plotada como uma função da diferença de energia entre os níveis.

por causa da simetria dos dois estados. Para o elétron em estados excitados mais altos, sua relaxação para o estado fundamental é um processo de relaxação via multicanais. Por exemplo, um elétron no estado $(0,-2)$ pode relaxar para o estado fundamental através da transição direta $(0,-2) \rightarrow (0,0)$ ou através de transições indiretas $(0,-2) \rightarrow (0,-1) \rightarrow (0,0)$ e $(0,-2) \rightarrow (0,1) \rightarrow (0,0)$ em campos magnéticos baixos como mostrado na Fig. 2.4. A relaxação através de transições indiretas é muitas vezes dominante. Os tempos de relaxação de um elétron dos estados $(0,-1)$, $(0,-2)$ e $(0,-3)$ para o estado fundamental $(0,0)$ são mostrados na Fig. 2.6(a). A transição direta dos estados $(0,-2)$ e $(0,-3)$ para o estado $(0,0)$ não contribui significativamente para o tempo de relaxação total para campos magnéticos pequenos onde mais canais de relaxação eficientes são possíveis. Como o espalhamento entre dois níveis de energia através de fônons LA é mais eficiente para pequenos valores de separação de energia, ou seja, longo comprimentos de onda, está claro que a relaxação do elétron de altos estados excitados para o estado fundamental é dominada pelos processo de relaxação indireto através de multicanais levando a um tempo de relaxação da ordem de nano para valores abaixo de nano-segundos. Verificamos ainda que o campo magnético externo aumenta o espalhamento elétron-fônon LA e, consequentemente, o processo de relaxação. A Fig. 2.6(b) mostra o tempo de relaxação total do estado $(0,1)$ para o estado fundamental. Diferente do estado $(0,-m)$, a diferença de energia entre este estado e o estado fundamental aumenta rapidamente com o aumento do campo magnético. Consequentemente, o espalhamento direto de $(0,+1)$ para o estado fundamental diminui rapidamente. Portanto, mais canais de transição indireta aparecem com o aumento do campo magnético. O nível de energia $(0,1)$ cruza com o nível $(0,-m)$ com $m = 1,2,3,\ldots$ . Perto do cruzamento, a transição de $(0,1)$ para $(0,-m)$ é muito eficiente devido ao espalhamento fônons LA de longo comprimento de onda (uma pequena diferença de energia). Quando um elétron é espalhado do estado $(0,1)$ para o estado $(0,-m)$, ele relaxa rapidamente

para o estado fundamental através do processo: $(0,1) \rightarrow (0,-m) \rightarrow (0,-m+1) \rightarrow ... \rightarrow (0,0)$ que é muito eficiente por que envolve apenas fônons LA com um grande comprimento de onda.

### 2.4.2 Dois pontos quânticos acoplados

Nesta seção, vamos estudar o espalhamento elétron-fônon LA em dois pontos quânticos acoplados (CQDs). Os dois pontos quânticos com mesma largura $W$ são acoplados através de uma barreira de largura $W_B$ e altura $V_0$ na direção $z$. O tunelamento entre os pontos quânticos altera os estados do elétron e a interação elétron-fônon. O estado simétrico ($l = 0$) e o estado anti-simétrico ($l = 1$) na direção $z$ são próximos quando a barreira entre os pontos quânticos não é muito fina. Temos que considerar dois estados nesta direção. A Fig. 2.7(a) mostra quatro níveis com energias mais baixas como uma função da largura da barreira $W_B$ na ausência do campo magnético externo para $\Omega = 2$ meV e $W = 100$ Å. Podemos ver que o primeiro estado excitado é $(n, m, l) = (0, 0, 1)$ quando $\Delta_{SAS} < \hbar\Omega$ (correspondendo a uma barreira maior que 43 Å). No caso de tunelamento forte (barreira fina) $\Delta_{SAS} > \hbar\Omega$ ($\Delta_{SAS}$ é a diferença de energia entre os dois estados dos poços quânticos acoplados), o primeiro estado excitado torna-se $(n, m, l) = (0, -1, 0)$. A existência dos estados $(n, m, l = 1)$ para baixa energia altera o processo de relaxação dos elétrons como descrito na seção anterior para um único ponto quântico. Por outro lado, a função de onda do elétron se distribui nos dois pontos quânticos levando os fônons de diferentes comprimentos de onda a acoplar com o elétron. Cinco diferentes transições envolvidas com os quatro primeiros níveis são indicadas na Fig. 2.7(a). A taxa de espalhamento elétron-fônon LA correspondente é mostrada na Fig. 2.7(b) como uma função da largura da barreira. Em comparação com o caso de um simples ponto quântico, nós observamos o seguinte: (i) Embora a diferença de energia entre os estados $(0, \pm 1, 0)$ e $(0, 0, 0)$ seja independente da largura da barreira, a taxa de espalhamento entre estes estados depende muito dela. (ii) Novos canais de espalhamento aparecem envolvendo o estado de baixa energia $(0, 0, l)$. A taxa de es-

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

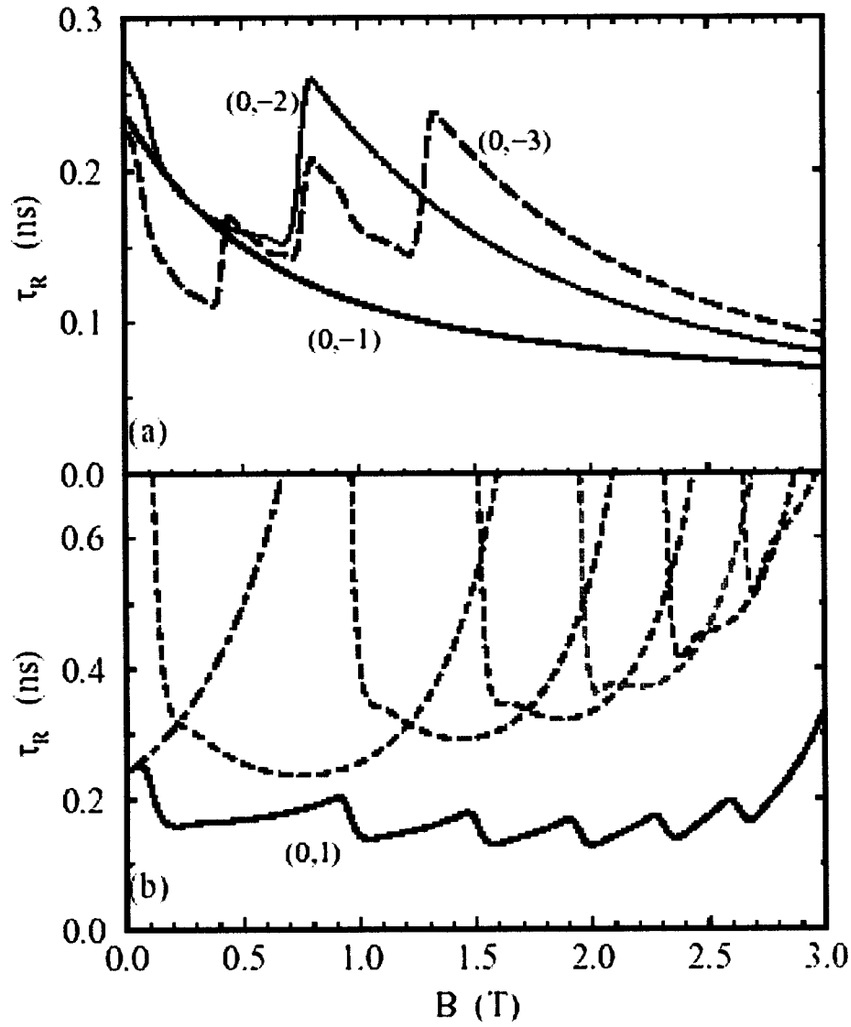


Figura 2.6: Tempo de relaxação do elétron do estados (a) $(0,-1)$, $(0,-2)$, $(0,-3)$ e (b) $(0,1)$ para o estado fundamental $(0,0)$ como uma função do campo magnético num ponto quântico de $\Omega = 2$ meV e $W = 50$ Å. As curvas coloridas mostram os vários canais de relaxação que são abertos em função do campo magnético.

palhamento $\tau^{-1}_{(001)\to(000)}$ (curva preta) é maior do que $\tau^{-1}_{(0\pm11)\to(0\pm10)}$ (curva verde), mas elas são muito parecidas devido ao fato que representam uma transição do mesmo estado anti-simétrico para o estado simétrico, na direção $z$. (iii) O nível de energia $(0,0,1)$ corta o nível $(0,\pm1,0)$ para $W_B = 43$ Å. Independente do espalhamento entre os dois estados ser igual a zero no cruzamento, ele aumenta rapidamente para o valor máximo quando os dois níveis se separam um do outro, quando a diferença de energia assume um valor em torno de 0.6 meV. Note que o primeiro estado excitado é o estado $(0,\pm1,0)$ para $W_B < 43$ Å. Mas ele torna-se o estado $(0,0,1)$ para altos valores de $W_B$.

Os efeitos da interferência da interação elétron-fônon na taxa de espalhamento em CQDs são também refletidos na dependência com o campo magnético. A Fig. 2.8 mostra a taxa de espalhamento do estado $(0,-1,0)$ para o estado fundamental $(0,0,0)$ como uma função do campo magnético para $W = 100$ Å e diferentes valores de $W_B$. Mostramos ainda, na Fig. 2.8, a taxa de espalhamento em SQDs de $W = 200$ Å e $W = 100$ Å que seriam os limites para largura de barreira igual a zero e infinito, respectivamente. Observamos que no limite onde $W_B$ assume pequenos valores, as barreiras extremamente finas modificam fortemente a taxa de espalhamento, podemos comparar, por exemplo, o espalhamento para uma barreira $W_B = 2$ Å com a taxa de espalhamento para uma barreira de largura zero (que correpondente a um ponto quântico com largura $W = 200$ Å). Noutro limite, quando a barreira é muito grande, encontramos que a taxa de espalhamento, para um ponto quântico simples com largura $W = 100$ Å, praticamente reproduz o resultado do SQD. Por causa dos níveis $(0,0,0)$ e $(0,0,1)$ [assim como os níveis $(0,m,0)$ e $(0,m,1)$] serem quase degenerados quando $W_B = 100$ Å (a diferença de energia entre esses níves é $0,066$ meV), a taxa de espalhamento de $(0,-1,0)$ para o estado fundamental degenerado é dada por $\left(\tau'_{(0-1)\to(00)}\right)^{-1} = \tau^{-1}_{(0-10)\to(000)} + \tau^{-1}_{(0-10)\to(001)}$. Esta taxa de espalhamento oscila levemente no SQD para uma

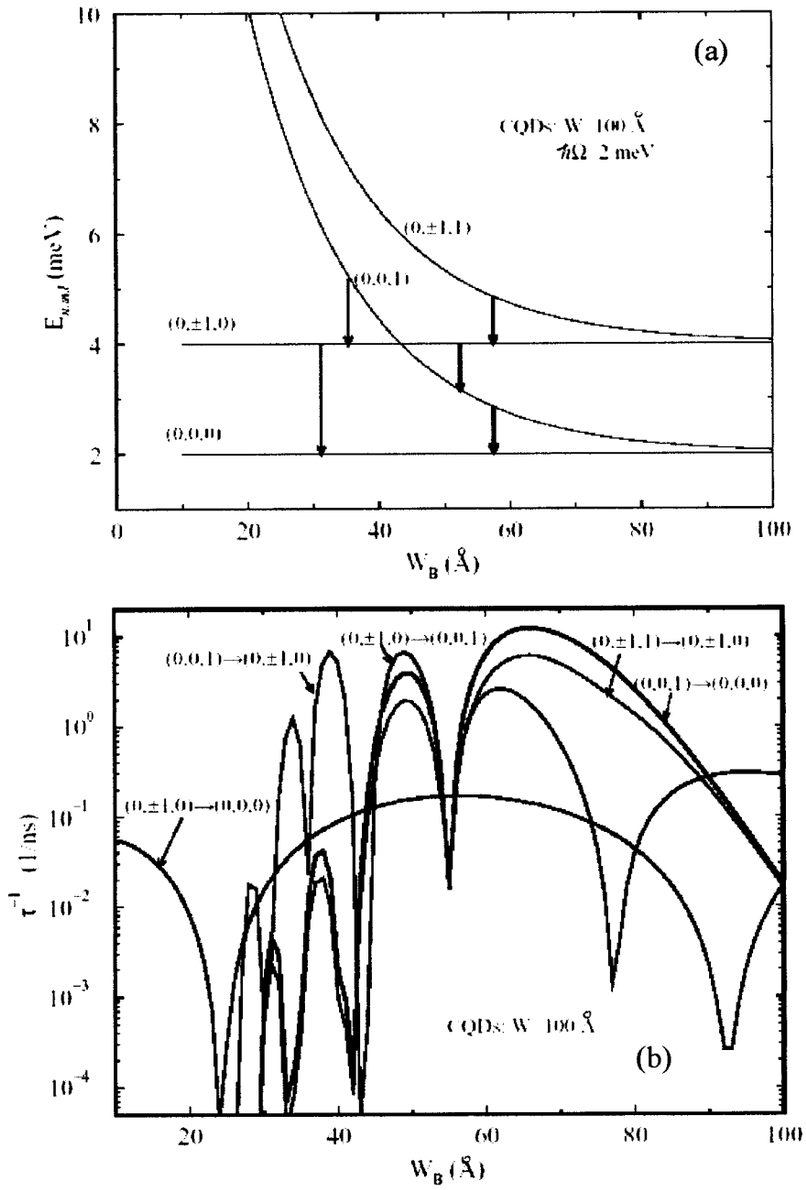


Figura 2.7: (a) Diagrama de transição e (b) as taxas de espalhamento como uma função da largura da barreira em dois pontos quânticos acoplados com $W = 100$ Å na ausência de campo externo.

mesma largura $W$. Além disso, consideraremos o estado $(0,-1,1)$ por que ele é quase degenerado com o estado $(0,-1,0)$. A taxa de espalhamento deste estado para o estado fundamental é dada por $\left(\tau''_{(0-1)\to(00)}\right)^{-1} = \tau^{-1}_{(0-11)\to(000)} + \tau^{-1}_{(0-11)\to(001)}$. Quando consideramos a taxa de espalhamento média $\left[\left(\tau'_{(0-1)\to(00)}\right)^{-1} + \left(\tau''_{(0-1)\to(00)}\right)^{-1}\right]/2$, ela praticamente reproduz a taxa de espalhamento $\tau^{-1}_{(0-1)\to(00)}$ do SQD (para largura da barreira infinita em CQDs).

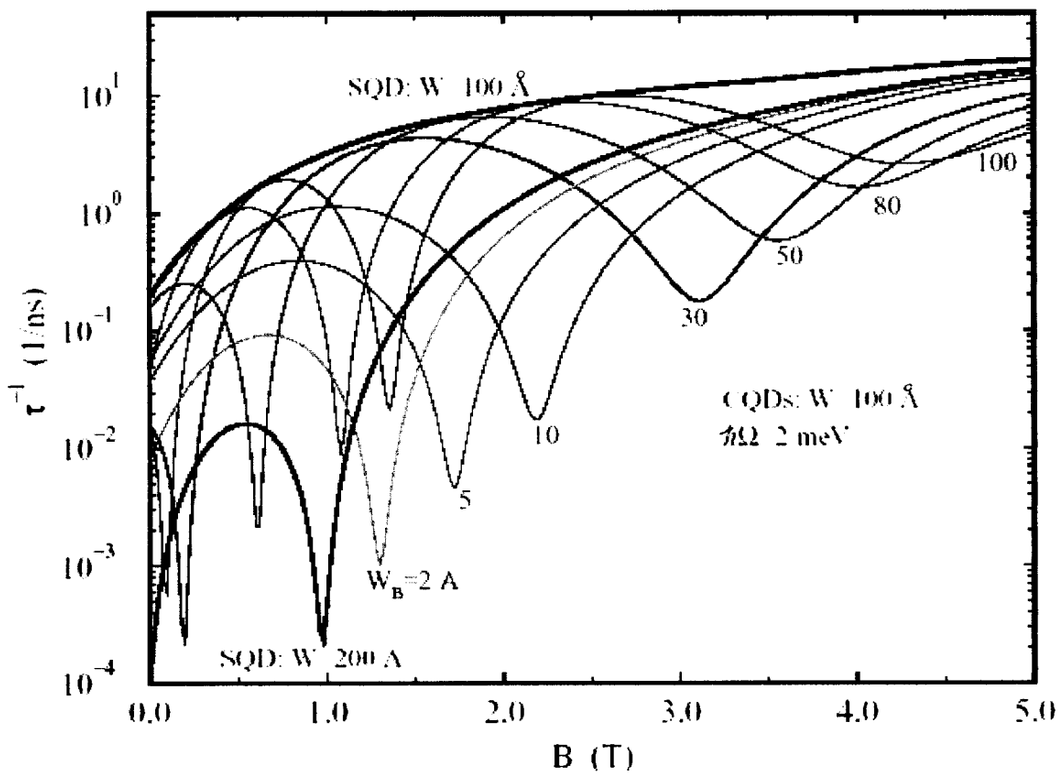


Figura 2.8: Taxa de espalhamento como uma função do campo magnético em pontos quânticos acoplados para diferentes largura da barreira com $\Omega = 2\ meV$ e $W = 10$ Å.

Quando aplicamos um campo elétrico externo na direção $z$ para os pontos quânticos acoplados, o elétron tende a ficar localizado em um dos dois pontos quânticos. A taxa de espalhamento no ponto quântico simples pode ser reproduzida por $\tau^{-1}_{(nml)\to(n'm'l)}$ (para $l = l'$)

de espalhamento como função do campo magnético para temperatura igual a zero do estado $(0,1,0)$ para o estado $(0,0,0)$ através de diferentes canais nos pontos quânticos acoplados com $\Omega = 2$ meV, $W = 100$ Å e $W_B = 30$ Å. Para este caso, o valor da energia de tunelamento é alto ( $\Delta_{SAS} = 4.486$ meV) e, consequentemente, os estados $(n, m, l = 1)$ não são considerados. O espalhamento através do canal 0 é uma transição direta. Os canais $j$ $(j = 1,2,3,4,5)$ indica a transição $(0,1,0) \rightarrow (0,-j,0) \rightarrow (0,-j+1,0) \rightarrow (0,0,0)$. Na Fig. (2.10) (b) são mostrados os diferentes canais de espalhamento. Está claro que, com o aumento do campo magnético, mais canais de relaxação do estado $(0,1,0)$ para o estado fundamental serão introduzidos. O canal 1 surge para $B = 0$, o canal 2 para $B = 0.855$ T, etc.. Acima do canal 5, tais canais dominam o processo de relaxação. Para $B > 2.64$ T, o canal 6 torna-se dominante o qual corresponde à transição $(0,1,0) \rightarrow (0,-6,0) \rightarrow (0,-4,0) \rightarrow (0,-2,0) \rightarrow (0,0,0)$. Estas transições indiretas para o estado fundamental são muito mais rápidas do que as transições diretas levando a um tempo de relaxação da ordem de nano para valores abaixo de nanosegundos em altos campos magnéticos.

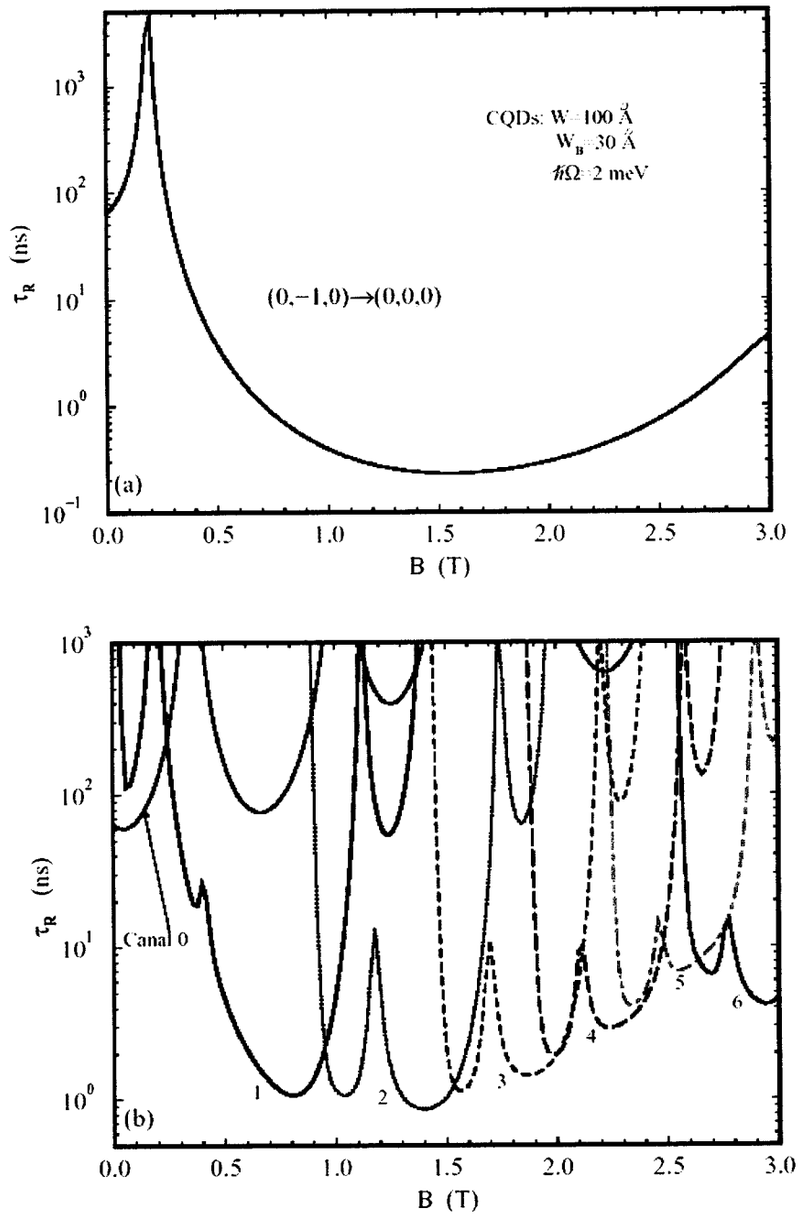


Figura 2.10: (a) Dependência da taxa de espalhamento com o campo magnético para a transição do estado (0,1,0) para o estados fundamental (0,0,0) em CQDs. (b) Os números indicam diferentes canais de espalhamento. Consideramos $\hbar\Omega = 2\ meV$, $W = 100$ Å, $W_B = 30$ Å.

## 2.5 Conclusão

No regime de baixos valores de energia, ou seja, $E << \hbar\omega_{LO}$, onde espalhamento elétron-fônon LA é dominante obtemos os seguintes resultados:

1. A taxa de espalhamento do elétron por fônons LA entre dois níveis específicos de energia do elétron confinado no ponto quântico depende da (i) diferença de energia entre estes níveis, (ii) do elemento de matriz da interação elétron-fônon LA (overlap). Porém a diferença de energia entre os níveis domina a taxa de espalhamento. Para uma energia fixa ($q_0$ fixo), a taxa de espalhamento entre quaisquer dois níveis possui a mesma ordem de grandeza;

2. Para o elétron em níveis de energia mais altos que o primeiro estado excitado, o que domina a relaxação são processos via multi-canais, que envolvem apenas emissão de fônon com um longo comprimento de onda;

3. Um campo magnético externo aplicado ao sistema aumenta a taxa de espalhamento, e consequentemente torna a relaxação mais rápida.

4. O espalhamento do elétron por fônons LA em dois pontos quânticos acoplados é muito semelhante ao espalhamento em um ponto quântico simples. Porém o tunelamento entre os dois pontos quânticos aumenta extensão da função de onda e consequentemente aumenta a largura efetiva do confinamento do elétron na direção $z$. Em função disto ocorrem modificações na taxa de espalhamento. Mostramos que a depressão da taxa de espalhamente nos dois pontos quânticos acoplados levando em consideração um campo magnético externo, que foi apontada em um trabalho recente [55], não existe. Pelo contrário, o campo magnético externo aumenta a taxa de espalhamento em dois pontos quânticos assim como no ponto quântico simples.

# Capítulo 3

# Tunelamento assistido por fônons LO em pontos quânticos acoplados

## 3.1 Introdução

Neste capítulo, estudamos teoricamente os efeitos da interação elétron-fônon LO nas propriedades microscópicas de elétrons confinados em dois pontos quânticos acoplados. Apresentamos cálculos mostrando as modificações dos estados eletrônicos nos pontos quânticos devido aos efeitos do polaron ressonante e não-ressonante, que pode afetar fortemente a dispersão de energia e a topologia dos orbitais eletrônicos dos estados envolvidos. Mostramos também que as modificações na topologia dos orbitais eletrônicos devido a interação elétron-fônon LO promovem a quebra das regras de seleção que afeta diretamente a absorção óptica próximo da ressonância polarônica. A interação elétron-fônon é tratada neste capítulo por teoria de perturbação modificada com as auto-energias obtidas pela função de Green [68], [58]. Aplicamos nossa teoria para pontos quânticos baseados numa estrutura semicondutora de $InAs/InAlAs$. Estudamos o efeito do tunelamento do elétron induzido por fônons e os efeitos da interação elétron-fônon LO na geometria dos estados eletrônicos nos pontos quânticos acoplados levando em consideração efeitos da temperatura finita.

Faremos nossas discussões baseadas no rearranjo de cargas devido à mistura dos estados

eletrônicos e os modos de fônons na região do acoplamento elétron-fônon ressonante.

O acoplamento elétron-fônon LO é levado em conta através do Hamiltoniano de Fröhlich. A relação de dispersão para o fônon longitudinal óptico possui um valor constante igual a $\omega_{LO}$. Consideramos a aproximação do fônon do bulk de $InAs$ visto que os fônons de interface dão uma contribuição desprezível [23]. A interação elétron-fônon LO é medida em termos da constante de acoplamento de Fröhlich, cujo valor para o $InAs$ é 0.05. A teoria prevê condições de acoplamento ressonante dos estados eletrônicos com os fônons LO levando a um splitting da densidade de estados e com um aumento do efeito para altas temperaturas. O efeito da temperatura é incluido dentro do formalismo e provoca a abertura de canais de absorção de fônons virtuais que podem levar a modificação do estado fundamental. O acoplamento entre os pontos quânticos é importante quando analizado como uma função da temperatura. A redistribuição de carga no espaço real juntamente com a modificação da simetria dos estados eletrônicos são, como será mostrado, sensíveis à intensidade do confinamento e o tamanho relativo dos dois pontos quânticos acoplados.

Esta mistura não está diretamente relacionada à relaxação do elétron, que é proibida dentro do formalismo usado neste trabalho e experimentalmente inexistente em pontos quânticos, mas para a hibridização dos níveis eletrônicos induzida pela emissão e absorção de fônons virtuais.

## 3.2 Efeito polarônico nos estados do elétron em pontos quânticos acoplados

A interação elétron-fônon LO em dois pontos quânticos acoplados, é tratada utilizando o potencial de confinamento parabólico e isotrópico no plano $x$-$y$, dado pela expressão (1.7) e um potencial quadrado de dois poços quânticos com altura da barreira finita, $V_0$, na direção $z$. Os níveis de energia do elétron confinado no ponto quântico sem a interação com os fônons LO da-

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

do pela expressão (1.8) são: $E_{n_x n_y l} = (n_x + n_y + 1)\hbar\Omega + E_l$. Consideramos as larguras dos poços iguais a $W_1$ e $W_2$ e a largura da barreira igual a $W_B$. Os números quânticos são $n_x = 0, 1, 2, ...$, $n_y = 0, 1, 2, ...$ no plano $x$-$y$ e $l = 1, 2, ...$, para a energia $E_l$ na direção $z$. A função de onda que descreve o elétron não perturbado pela interação com os fônons é $\psi_{n_x n_y l}(x, y, z)$. Vamos considerar os pontos quânticos compostos de $InAs/In_{0,52}Al_{0,48}As$. Manteremos o valor da largura de um dos poços fixa e igual 100 Å. A dependência das propriedades eletrônicas e ópticas com o confinamento parabólico é um assunto de intenso interesse em pontos quânticos e estes resultados podem ser estendidos para um sistema de dois pontos quânticos acoplados. Então, focaremos nossa atenção nas propriedades que são inerentes aos sistemas de duplos pontos quânticos, tais como a dependência das propriedades eletrônicas e ópticas com a razão entre as larguras dos dois poços, o tamanho relativo $(W_2/W_1)$, e os efeitos da redistribuição de carga entre os dois pontos quânticos.

Podemos escrever a energia e a função de onda do sistema desacoplado composto pelo elétron mais os fônons, da seguinte forma

$$E^{(0)}_{n_x n_y l; n_q} = E_{n_x n_y l} + n_q \hbar\omega_{LO}, \tag{3.1}$$

e

$$\left|\Psi^{(0)}_{n_x n_y l; n_q}\right\rangle = \left|\psi_{n_x n_y l}\right\rangle \otimes \left|n_q\right\rangle. \tag{3.2}$$

Calculamos a renormalização da energia do elétron quando este interage com os fônons LO auto-consistentemente através do formalismo da função de Green (Apêndice A-1) [57], [2]

$$G^{-1}_{n_x n_y l}(E) = E - E_{n_x n_y l} - \Sigma_{n_x n_y l}(E) \tag{3.3}$$

onde $\Sigma_{n_x,n_y,l}(E)$ é a auto-energia do elétron acoplado com os fônons LO dada por

$$\begin{aligned}\Sigma_{n_x n_y l}(E) &= \sum_{n'_x,n'_y,l';\vec{q}} \int_{-\infty}^{\infty} ds A_{n'_x n'_y l'}(s) \left|M_{ij}\right|^2 \times \\ &\times \left[\frac{N_q}{E+\hbar\omega_{LO}-s+i\delta} + \frac{N_q+1}{E-\hbar\omega_{LO}-s+i\delta}\right]. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Na expressão acima $M_{ij} = V(q)\langle i| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |j\rangle = V(q)\langle n_x n_y l| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |n'_x n'_y l'\rangle$, $V(q) = \hbar\omega_{LO}\left[\hbar/(2m^*\omega_{LO})\right]^{1/4}$ $\sqrt{4\pi\alpha/(q^2 V_{ol})}$ para os fônons LO e $N_q = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T}\right) - 1\right]^{-1}$. A função espectral $A_{(n_x n_y l)}(E)$ para os níveis $(n_x n_y l)$ é definida em função da auto-energia por

$$A_{n_x n_y l}(E) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left[E - E_{n_x n_y l} - \Sigma_{n_x n_y l}(E)\right]^{-1}. \tag{3.5}$$

A equação de Dyson pode ser resolvida auto-consistentemente para obter a energia do polaron. Esta aproximação inclui efeitos da interação elétron-fônon de todas as ordens para acoplamento com todos os níveis eletrônicos através de fônons virtuais, que ajuda a contornar as dificuladadesde outras aproximações perturbativas que podem levar a a divergências no regime de ressonância. Efeitos da temperatura podem ser incluídos no cálculo da auto-energia, levando à renormalização do estado fundamental através da absorção de fônon virtual para $T > 0$, como pode ser visto do segundo termo da equação (3.4).

Os resultados dos cálculos auto-consistentes da energia do polaron como uma função de $W_2/W_1$ são mostrados na Fig. 3.1 para $T = 0$ e na Fig. 3.2 para $T = 300\ K$. Nos cálculos, nos fixamos $W_1 = 100$ Å e $W_B = 30$ Å (barreira entre os pontos quânticos). Escolhemos para a freqüência do confinamento parabólico no plano $x$-$y$ um valor adimensional, $\Omega/\omega_{LO} = 1.4$, fora da ressonância, desta maneira o acoplamento ressonante é determinado pelos estados de energia relacionados ao confinamento na direção $z$. A ressonância polarônica é sensível ao tamanho relativo dos dois pontos quânticos acoplados e sua região muda com a modificação dos valores absolutos das dimensões do sistema, ou seja, modificações de $W_1$, $W_2$, $W_B$ e $\Omega$. Na Fig. 3.1 mostramos o estado fundamental praticamente não-perturbado $(0,0,0)$ e o primeiro

estado excitado perturbado pela interação elétron-fônon LO, $(0,0,1)$ e $(1,0,0)$. Para $T = 0$ nós obtemos anticrossings e modificações na forma dos estados $(0,0,1)$ e $(0,1,0)$ como consequência do acoplamento ressonante com o estado fundamental $(0,0,0)$, o que é consistente com os estados de "everlasting polaron", tal como nas Refs. [9], [52]. Como é esperado, com aumento da largura relativa $W_2/W_1$ temos duas diferentes condições de ressonância. Na ressonância a conservação da energia abre canais para acoplamento entreníveis através de emissão de fônon virtual e subsequente absorção.

Entretanto, observamos as modificações no estado fundamental à $T = 300\ K$ na Fig. 3.2, quando canais de absorção de fônon virtual são abertos. Este processo é uma consequência do segundo termo da equação (3.4), devido ao fato de que o estado fundamental $(0,0,0)$ pode absorver um fônon para acoplar ressonantemente com o estado $(0,0,1)$ à temperatura finita. Para baixas temperaturas, este efeito não ocorre no estado fundamental [5].

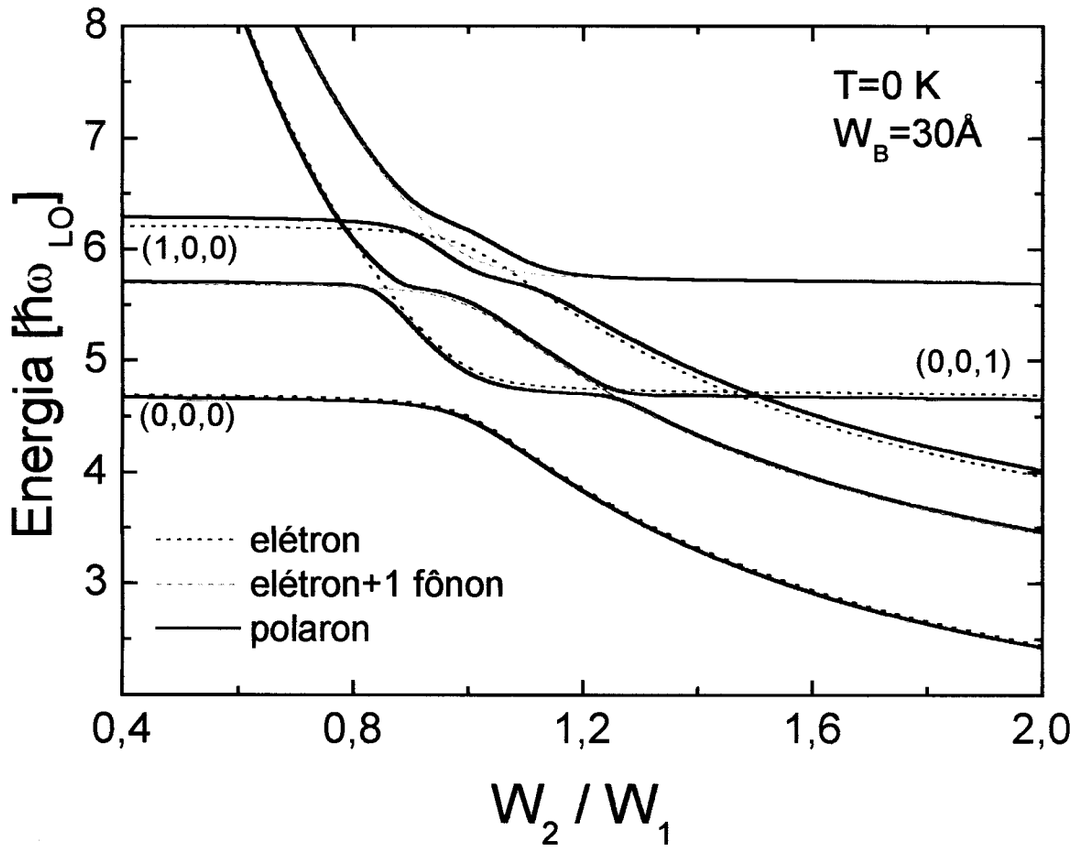


Figura 3.1: Energia do polaron (curva sólida) calculada como uma função da largura relativa $W_2/W_1$ dos dois pontos quânticos acoplados para T = 0 K com $W_1$ = 100 Å e $W_B$ = 30Å. A curva pontilhada é energia do elétron e a curva tracejada-pontilhada é energia do elétron + um fônon LO.

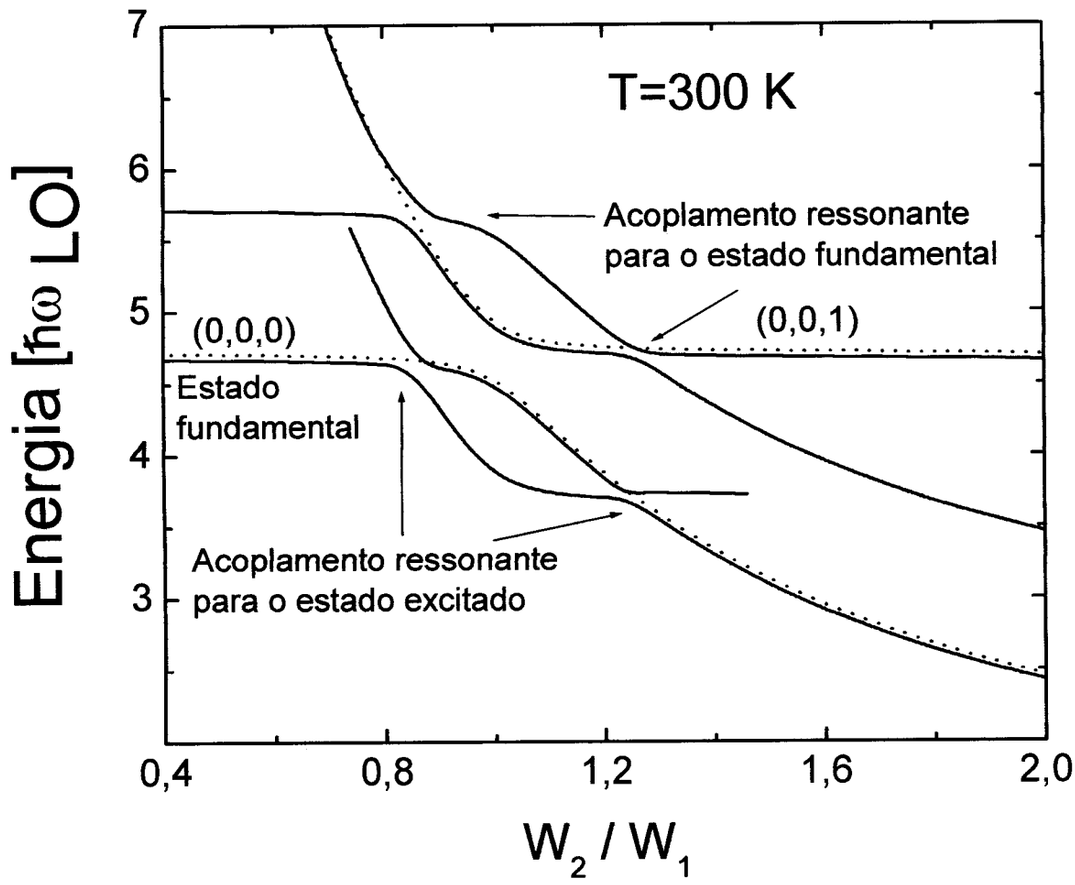


Figura 3.2: Energia do polaron (curva sólida) calculada como uma função da largura relativa $W_2/W_1$ dos dois pontos quânticos acoplados para T = 300 K com $W_1$ = 100 Å e $W_B$ = 30Å. A curva pontilhada é energia do elétron e a curva tracejada-pontilhada é energia do elétron + um fônon LO.

## 3.3 Tunelamento assistido por fônon LO

De maneira diferente do caso de um ponto quântico simples, surge a contribuição de dois diferentes ponto quânticos para a energia total do sistema. Consequentemente, as modificações induzidas pela interação elétron-fônon LO podem também serem entendidas como mudanças na distibuição da densidade eletrônica nos pontos quânticos acoplados, que em certas configurações podem ser entendidas como uma transferência da densidade de carga efetiva entre os dois pontos quânticos. O acoplamento entre pontos quânticos pode também modificar a geometria dos orbitais eletrônicos. Para verificar as modificações topológicas dos orbitais eletrônicos nós calculamos a função de onda do sistema elétron-fônon acoplado.

A função de onda $\left|\Psi_{n_x,n_y,l;n_q}\right\rangle$, renormalizada pela interação elétron-fônon LO, pode ser escrita como uma combinação das funções de onda eletrônicas não perturbadas $\left|\psi_{n_x n_y l}\right\rangle$ e a função de onda do fônon $|n_q\rangle$, com o número de fônons $n_q = 0, 1, \ldots$ . Para a aproximação de primeira ordem, obtida através da teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger [73], temos

$$|\Psi_k\rangle = \left|\Psi_k^{(0)}\right\rangle + \sum_{k' \neq k} \frac{\left\langle \Psi_{k'}^{(0)} \middle| H_{e-f} \middle| \Psi_k^{(0)} \right\rangle}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \left|\Psi_{k'}^{(0)}\right\rangle, \tag{3.6}$$

onde $k$ representa os números quânticos $(n_x, n_y, l; n_q)$.

Substituindo as equações (3.1) e (3.2) em (3.6) temos

$$\left|\Psi_{n_x n_y l;n_q}\right\rangle = \left|\psi_{n_x n_y l}; n_q\right\rangle + \sum_{n'_x n'_y l'} \sum_{\vec{q}, n'_q} \frac{\left\langle \psi_{n'_x n'_y l'}; n'_q \middle| H_{e-f} \middle| \psi_{n_x n_y l}; n_q \right\rangle}{E_{n_x n_y l} - E_{n'_x n'_y l'} + \left(n_q - n'_q\right) \hbar\omega_{LO}} \left|\psi_{n'_x n'_y l'}; n'_q\right\rangle, \tag{3.7}$$

com o elemento de matriz

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_{n'_x n'_y l'}; n'_q \middle| H_{e-f} \middle| \psi_{n_x n_y l}; n_q \right\rangle &= V(q) \Big( \sqrt{n_q} \left\langle \psi_{n'_x n'_y l'} \middle| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \middle| \psi_{n_x n_y l} \right\rangle \delta_{n'_q, n_q - 1} \\ &\quad - \sqrt{n_q + 1} \left\langle \psi_{n'_x n'_y l'} \middle| e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \middle| \psi_{n_x n_y l} \right\rangle \delta_{n'_q, n_q + 1} \Big). \end{aligned} \tag{3.8}$$

Introduzindo a equação (3.8) na equação (3.7) obtemos

$$\left|\Psi_{n_x n_y l;n_q}\right\rangle = \left|\psi_{n_x n_y l}; n_q\right\rangle + \sum_{n'_x,n'_y,l'} \frac{\sum_{\vec{q}} V(q)\left(\sqrt{n_q}\left\langle\psi_{n'_x n'_y l'}\right| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\left|\psi_{n_x n_y l}\right\rangle\right)}{E_{n_x n_y l} - E_{n'_x n'_y l'} + \hbar\omega_{LO}}\left|\psi_{n'_x n'_y l'}; n_q - 1\right\rangle +$$
$$+ \sum_{n'_x,n'_y,l'} \frac{\sum_{\vec{q}} V^*(q)\left(\sqrt{n_q+1}\left\langle\psi_{n'_x n'_y l'}\right| e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\left|\psi_{n_x n_y l}\right\rangle\right)}{E_{n_x n_y l} - E_{n'_x n'_y l'} - \hbar\omega_{LO}}\left|\psi_{n'_x n'_y l'}; n_q + 1\right\rangle. \quad (3.9)$$

Para efeito de cálculos, nós modificamos a função de onda do polaron, escrita acima, da seguinte forma: Primeiro, assumimos que $n_q$, que aparece no numerador, é dado pelo seu valor no equilíbrio térmico à temperatura T, ou seja, $\langle n_q\rangle = N_q$. Depois, seguindo a idéia da teoria de Wigner-Brillouin melhorada (IWBPT) proposta por Lindermann e colaboradores [69] para estudo dos estados do magnetopolaron ressonante [70], [71], nós substituimos a energia $E_{n_x n_y l}$ nos denominadores da expressão (3.8) pela energia renormalizada obtida da solução das equações (3.4) e (3.5)

$$\tilde{E}_{n_x n_y l} = E_{n_x n_y l} + \mathrm{Re}\,\Sigma_{n_x n_y l}\left(\tilde{E}_{n_x n_y l}\right) \quad (3.10)$$

Assim a divergência para valores de energia próximos da ressonância pode ser evitada ($E_{n_x n_y l} - E_{n'_x n'_y l'} \sim \pm\hbar\omega_{LO}$). A IWBPT é bastante eficiente para o cálculo da energia do polaron no regime de acoplamento ressonante e não ressonante e é amplamente utilizada [72], [22]. Acreditamos que as mudanças aplicadas na função de onda renormalizada nos levarão a resultados interessantes.

A função de onda pode ser reescrita da seguinte forma

$$\left|\Psi_{n_x n_y l;n_q}\right\rangle = \left|\psi_{n_x n_y l}; n_q\right\rangle + \sqrt{N_q} \sum_{\substack{n'_x,n'_y,l' \neq \\ n_x,n_y,l}} A^{(+)}_{n'_x n'_y l'}\left|\psi_{n'_x n'_y l'}; n_q - 1\right\rangle +$$
$$\sqrt{N_q+1} \sum_{\substack{n'_x,n'_y,l' \neq \\ n_x,n_y,l}} A^{(-)}_{n'_x n'_y l'}\left|\psi_{n'_x n'_y l'}; n_q + 1\right\rangle, \quad (3.11)$$

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

onde

$$A^{(\pm)}_{n'_x n'_y l'} = \sum_{\vec{q}} \frac{V(q) \left\langle \psi_{n'_x n'_y l'} \middle| e^{\pm i\vec{q}\cdot\vec{r}} \middle| \psi_{n_x n_y l} \right\rangle}{\tilde{E}_{n_x n_y l} - E_{n'_x n'_y l'} \pm \hbar\omega_{LO}}. \tag{3.12}$$

Os canais de acoplamento ressonante entre os pontos quânticos levam a uma transferência efetiva de carga de um ponto quântico para o outro. Este processo, chamado tunelamento induzido por fônon, pode ser caracterizado pela projeção da função de onda renormalizada $\Psi_{n_x n_y 0(1)}$ de um ponto quântico sobre a componente da função de onda não-perturbada do outro ponto quântico $\psi_{n_x n_y 1(0)}$. Para o estado fundamental e o primeiro estado excitado nós podemos caracterizar dois processos diferentes, um relacionado com absorção de fônon real a altas temperaturas e o outro associado à emissão de fônon virtual:

$$\Lambda^{\text{absorção}} = \left| \langle \psi_{001}, n_q - 1 | \, \Psi_{000;n_q} \rangle \right|,$$

e

$$\Lambda^{\text{emissão}} = \left| \langle \psi_{000}, n_q + 1 | \, \Psi_{001;n_q} \rangle \right|. \tag{3.13}$$

A Fig. 3.3 mostra o fator de tunelamento ($\Lambda$) para o estado fundamental e o primeiro estado excitado a uma temperatura de $300K$. O fator de tunelamento devido a absorção de fônon caracteriza os efeitos sobre o estado fundamental. Ele é menor que o fator de tunelamento devido a emissão de fônon por causa do baixo número médio de fônons reais presentes no sistema para temperatura relativamente altas.

Nas curvas mostradas na Fig. 3.3 podemos ver três estruturas diferentes. Os picos A e B, nos lados esquerdo e direito, respectivamente, estão relacionados com o acoplamento ressonante entre os pontos quânticos. O pico C está relacionado ao fato de que, para dois pontos quânticos simétricos ($W_2/W_1 = 1$), a interação elétron-fônon LO é fortemente aumentada por causa do tunelamento ressonante entre os dois pontos quânticos, que depende

da largura da barreira como mostra o quadro na Fig. 3.3. A intensidade do acoplamento elétron-fônon LO, que está mostrada no quadro da Fig. 3.3, é calculada apartir da magnitude $\sum_{\vec{q}} |V(q)|^2 \left|\langle n_x, n_y, l| \, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \, |n'_x, n'_y, l'\rangle\right|^2$.

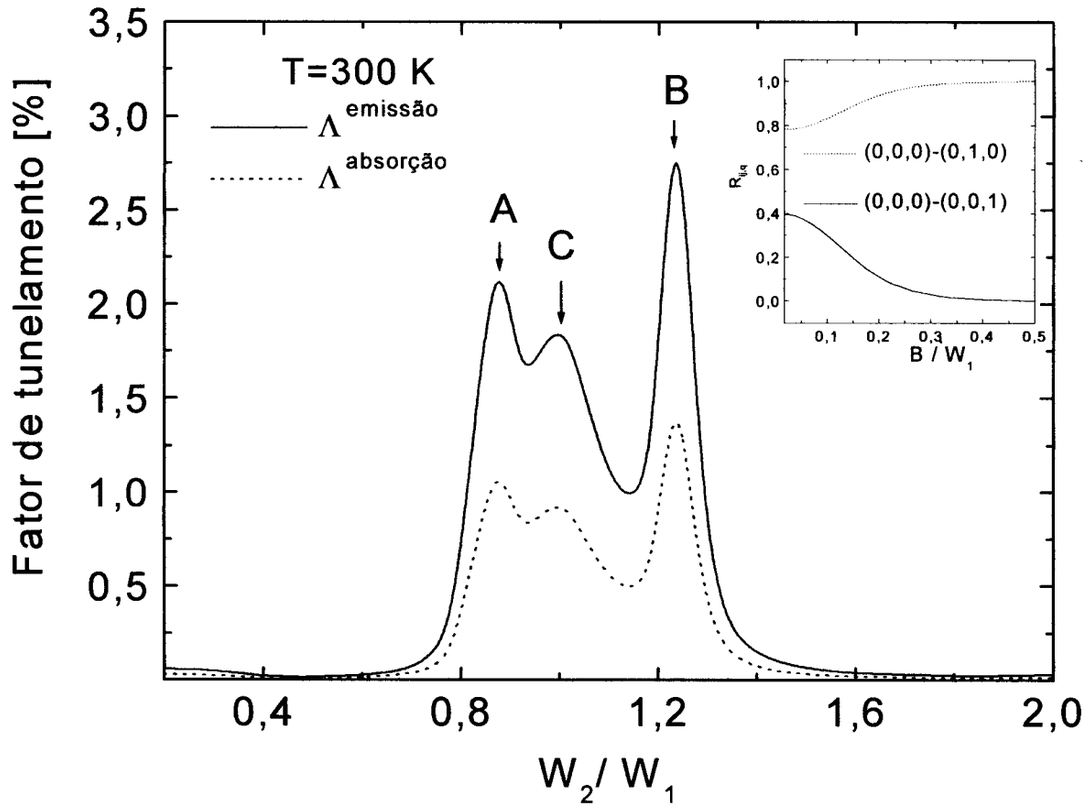


Figura 3.3: Fator de tunelamento para $T = 300K$ como uma função da largura relativa entre os pontos quânticos ($W_2/W_1$). A linha sólida (pontilhada) corresponde à transferência de carga efetiva devido a emissão (absorção) de fônon virtual ressoante do estado excitado (0,0,1) [estado fundamental (0,0,0)] para o estado fundamental (0,0,0) [estado excitado (0,0,1)]. O quadro mostra a intensidade da interação elétron-fônon LO como uma função da largura da barreira entre os pontos quânticos ($W_B/W_1$).

## 3.4 Modificações nos orbitais eletrônicos

Mostramos que a mistura dos estados entre pontos quânticos ocorre devido a absorção e emissão de fônon virtual (para temperaturas finitas) para pontos quânticos acoplados através da barreira. Nós demonstramos agora que existe uma transferência de carga efetiva de um ponto quântico para outro acompanhada de modificações na topologia dos orbitais eletrônicos, que afetam as regras de seleção ópticas, pelo menos no regime de acoplamento ressonante. Tais modificações aparecem através da hibridização dos níveis eletrônicos quando ocorre o acoplamento ressonante do elétron com os fônons.

Para calcular a distribuição espacial da densidade de eletrons, utilizamos as equações (3.11) e (3.12) e resolvemos um problema onde as contribuições de todos os níveis degenerados e não-degenerados são levados em conta e acoplados através da interação elétron-fônons LO. A função de onda do sistema de um elétron acoplado com os fônons LO pode ser expandida sobre uma base ortogonal de estados de fônons da seguinte forma

$$\Psi_{n_x n_y l;n_q}(\vec{r}) = \psi_{n_x n_y l}(\vec{r})\,|n_q\rangle + \xi^{(A)}_{n_x n_y l}(\vec{r})\,|n_q - 1\rangle + \xi^{(B)}_{n_x n_y l}(\vec{r})\,|n_q + 1\rangle\,, \tag{3.14}$$

com

$$\xi^{(A)}_{n_x n_y l}(\vec{r}) = \sqrt{N_q} \sum_{\substack{n'_x, n'_y, l' \neq \\ n_x, n_y, l}} A^{(+)}_{n'_x n'_y l'} \left|\psi_{n'_x n'_y l'}(\vec{r})\right\rangle$$

e

$$\xi^{(B)}_{n_x n_y l}(\vec{r}) = \sqrt{N_q + 1} \sum_{\substack{n'_x, n'_y, l' \neq \\ n_x, n_y, l}} A^{(-)}_{n'_x n'_y l'} \left|\psi_{n'_x n'_y l'}(\vec{r})\right\rangle, \tag{3.15}$$

onde $\vec{r}$ denota as coordenadas do elétron sem acoplamento. A densidade eletrônica é então caracterizada pela magnitude

$$\left|\Psi_{n_x n_y l;n_q}(\vec{r})\right|^2 = \left|\psi_{n_x n_y l}(\vec{r})\right|^2 + \left|\xi^{(A)}_{n_x n_y l}\right|^2 + \left|\xi^{(B)}_{n_x n_y l}\right|^2, \tag{3.16}$$

e os orbitais eletrônicos podem ser obtidos como solução tridimensional da equação

$$\left|\Psi_{n_x n_y l; n_q}(\vec{r})\right|^2 = \text{constante}. \tag{3.17}$$

Obtemos então as superfícies de densidade eletrônica constante mostradas na Fig. 3.4. Para dois pontos quânticos acoplados com uma razão $W_2/W_1 = 0,85$ entre suas larguras.

Por causa da simetria cilíndrica, o estado fundamental e o primeiro estado excitado do ponto quântico são do tipo $s$ ($n_x = 0, n_y = 0$) e do tipo $p$ ($n_x = 1, n_y = 0$), respectivamente como mostrado na Fig. 3.4 (a)-(c). Quando a interação elétron-fônon LO é incluída, diferentes canais de transferência de carga entre os pontos quânticos são abertos. Ocorre uma modificação muito particular do estado fundamental, como mencionado antes, ocorrendo apenas para temperaturas suficientemente altas e mediada pela absorção de fônon. Num processo de tunelamento assistido por fônon, uma transferência de carga efetiva ocorre sob a condição de polaron ressonante do estado excitado $(0,0,1)$, mais localizado no ponto quântico estreito $W_2$, para o estado fundamental $(0,0,0)$, mais localizado no ponto quântico largo $W_1$. Isto leva a um crescimento do orbital do estado fundamental em $W_2$, como mostrado na Fig. 3.4 (d), balanceando a densidade de carga entre os dois lados, $W_1$ e $W_2$. Consequentemente, o sistema responde a excitações externas, tais como luz e combinações de campos externos, sendo influênciado pela redistribuição da densidade de carga entre os dois pontos quânticos.

Os níveis mais altos são também fortemente modificados pelo acoplamento elétron-fônon LO ressonante. Neste caso ocorre uma transferência de carga efetiva do ponto quântico mais largo para o mais estreito através da emissão de fônon a baixas temperaturas. Podemos observar na Fig. 3.4 (e) a mudança na forma do orbital do primeiro estado excitado $(0,0,1)$ na condição de acoplamento elétron-fônon LO ressonante. Juntamente com a transferência de carga efetiva, que aumenta a nuvem de densidade no ponto quântico com $W_1$, levando a uma modificação topológica dos orbitais eletrônicos como visto na Fig. 3.4 (f). As modificações

do estado excitado tipo-$s$ $(0,0,1)$ (Fig. 3.4 (b)) é um resultado de sua hibridização com o estado tipo-$p$ $(0,1,0)$ (Fig. 3.4 (c)) na ressonância. Descreveremos na próxima seção que estas modificações topológicas em certas direções podem afetar fortemente a resposta óptica do sistema de dois pontos quânticos acoplados.

## 3.5 Efeitos no espectro de absorção óptica

É esperado que as regras de seleção para transição óptica sejam modificadas de acordo com as mudanças topológicas provocadas nos orbitais eletrônicos. Campos de luz linearmente polarizados acoplam os estados eletrônicos com diferente paridade espacial, na direção de polarização caracterizada pelo vetor de polarização, $e_L$. A transição eletrônica induzida por fóton para luz linearmente polarizada é proporcional a um elemento de matriz da forma $\langle\beta'|\vec{p}_{e_L}|\beta\rangle$, onde $\vec{p}_{e_L} \sim \vec{\nabla}_{e_L}$. Numa representação tridimensional, este processo pode ser entendido como o acoplamento de orbitais, $\beta'$ e $\beta$, com diferentes simetrias por um campo linear $\vec{p}_{e_L}$.

Em um sistema de um elétron, o coeficiente de absorção para transição intrabanda pode ser calculado com aproximação de dipolo usando a regra de ouro de Fermi e os estados renormalizados $\Psi_{n_x n_y l;n_q}$,

$$\eta \sim \sum_{n_x,n_y,l;n_q} \left|\left\langle \Psi_{n_x n_y l;n_q} \left|\vec{p}_{e_L}\right| \Psi_{(000);n_q}\right\rangle\right|^2 L\left(E_{n_x n_y l;n_q} - E_{000} - \hbar\omega_L\right), \tag{3.18}$$

onde $L(x)$ é a função Lorenziana renormalizada cuja largura é determinada exclusivamente pela parte imaginária da energia do polaron obtida na equação (3.4). Considerando a simetria dos pontos quânticos acoplados, é apropriado escolher duas polarizações da luz incidente: uma no plano $x$-$y$ $(e_L \parallel x)$ e a outra paralela a direção $z$ $(e_L \parallel z)$. Calculamos os coeficientes de absorção para as duas configurações variando o tamanho relativo do ponto quântico $W_2/W_1$.

Na condição de acoplamento ressonante, obtivemos desvios da resposta óptica de elétrons "limpos" denotados pela linha tracejada na Fig. 3.5 e 3.6. Estes desvios são atribuí-

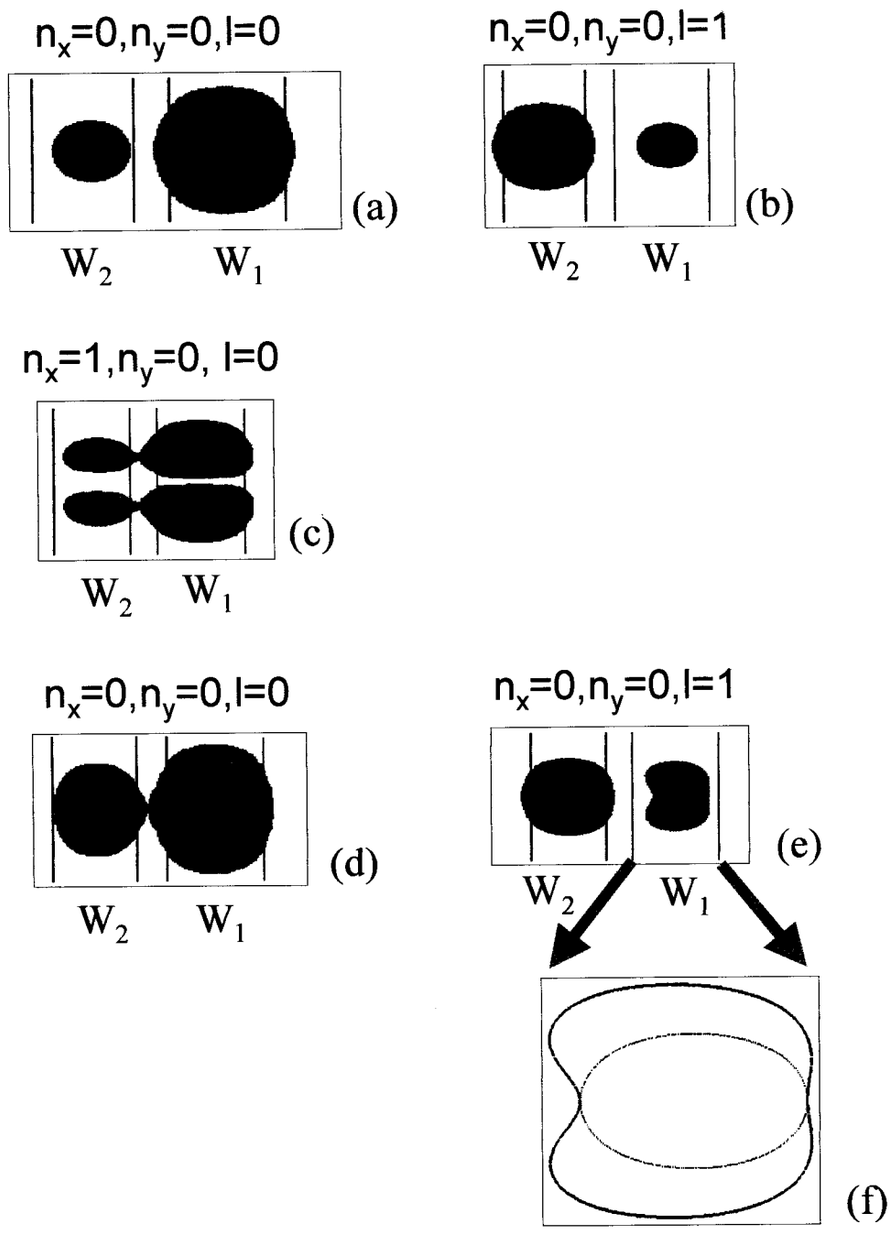


Figura 3.4: Orbitais eletrônicos para $W_2/W_1$=0,85. Os orbitais do elétron sem acoplamento são mostrados nas figuras (a) $(0,0,0)$ , (b) $(0,0,1)$ e (c) $(1,0,0)$. Os orbitais eletrônicos renormalizados devido aos efeitos polarônicos são mostrados em (d) $(0,0,0)$ e (e) $(0,0,1)$. Em (f) a curva sólida (tracejada) mostra parte do contorno do orbital do estados $(0,0,1)$ no ponto quântico de largura $W_1$ com e sem os efeitos polarônicos.

dos à relaxação das regras de seleção devido a hibridização do orbital como mostrado antes. Na Fig. 3.5 o coeficiente de absorção foi calculado para a polarização $e_L \parallel x$. Neste caso, as regras de seleção para os elétrons sem interação são dadas por $\Delta_l = 0$ e $\Delta_{n_x n_y} = 1$ (transições permitidas). As transições de elétrons sem interação ocorrem apenas entre o estado $s$ $(0,0,0)$ e o estado $p$ $(1,0,0)$, correspondendo a linha tracejada para $E = 1.4\hbar\omega_{LO}$ no quadro de 3.5. Devido as modificações topológicas no estado $(0,0,1)$ induzidas pela interação elétron-fônon (a distorção na direção $x$ como mostrada na Fig. 3.4 (e)), a transição entre os estados $(0,0,0)$ e $(0,0,1)$ mais a energia de um fônon LO também é permitida. Como um resultado, o espectro de absorção é fortemente modulado devido ao acoplamento elétron-fônon e o tunelamento entre os pontos quânticos.

O espectro de absorção de luz com polarização $e_L \parallel z$ também é afetado pela interação elétron-fônon. As regras de seleção para elétrons sem interação são $\Delta_l = 1$ e $\Delta_{n_x n_y} = 0$, para este caso. A transição entre os estados $(0,0,0)$ e $(0,0,1)$ é permitida para este sistema apenas na ausência da interação elétron-fônon seguindo a linha tracejada do quadro da Fig. 3.6. A interação elétron-fônon LO acopla o estado excitado $(0,0,1)$ e o estado $(0,0,0)$ mais a energia de um fônon, criando um estado hibrido. Consequentemente, transições permitidas aparecem próximo da ressonância do estado fundamental para o estado híbrido. Isto explica o aparecimento de picos extra próximo da ressonância para $e_L \parallel z$.

Visto que as modificações topológicas dos orbitais eletrônicos são efetivas apenas em certas direções espaciais, a luz linearmente polarizada pode servir como uma ferramenta sua detecção.

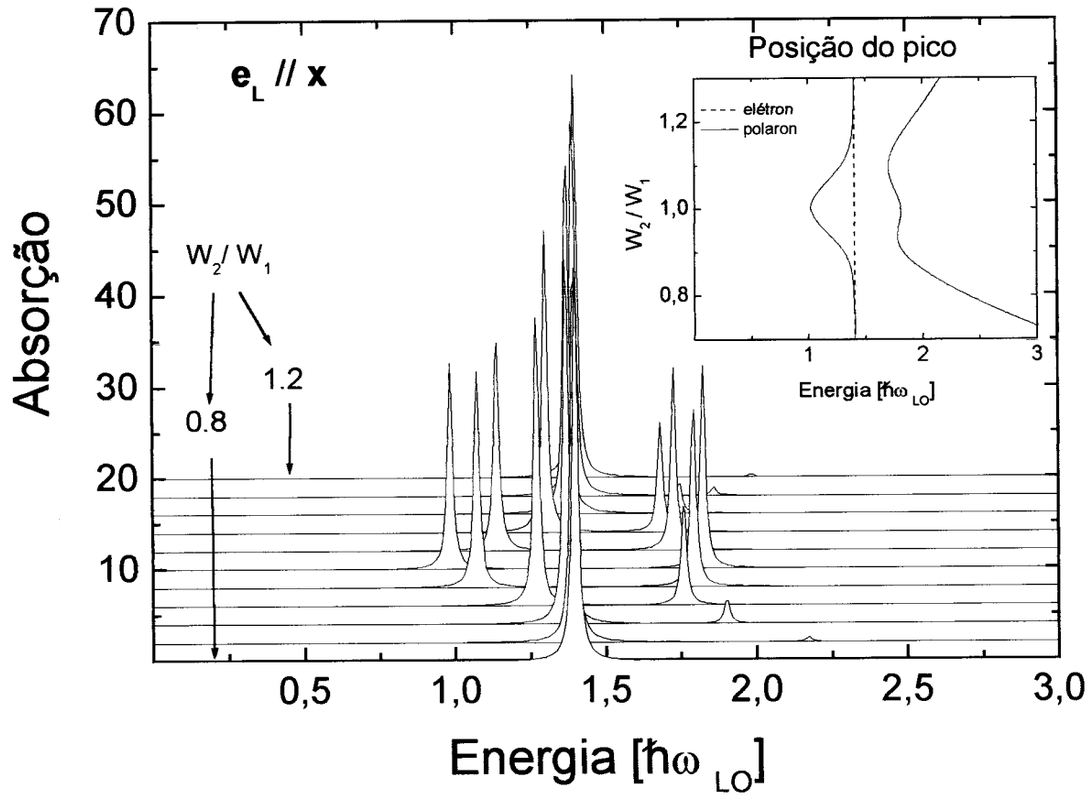


Figura 3.5: Espectro de absorção com $e_L//x$ para diferentes tamanhos relativos dos pontos quânticos $W_2/W_1$. As diferentes curvas no quadro apresentam uma separação $\Delta\left(W_2/W_1\right) = 0,04$. O quadro inserido mostra a posição dos picos de absorção. A linha tracejada representa a posição das transições ópticas permitidas para elétron sem interação.

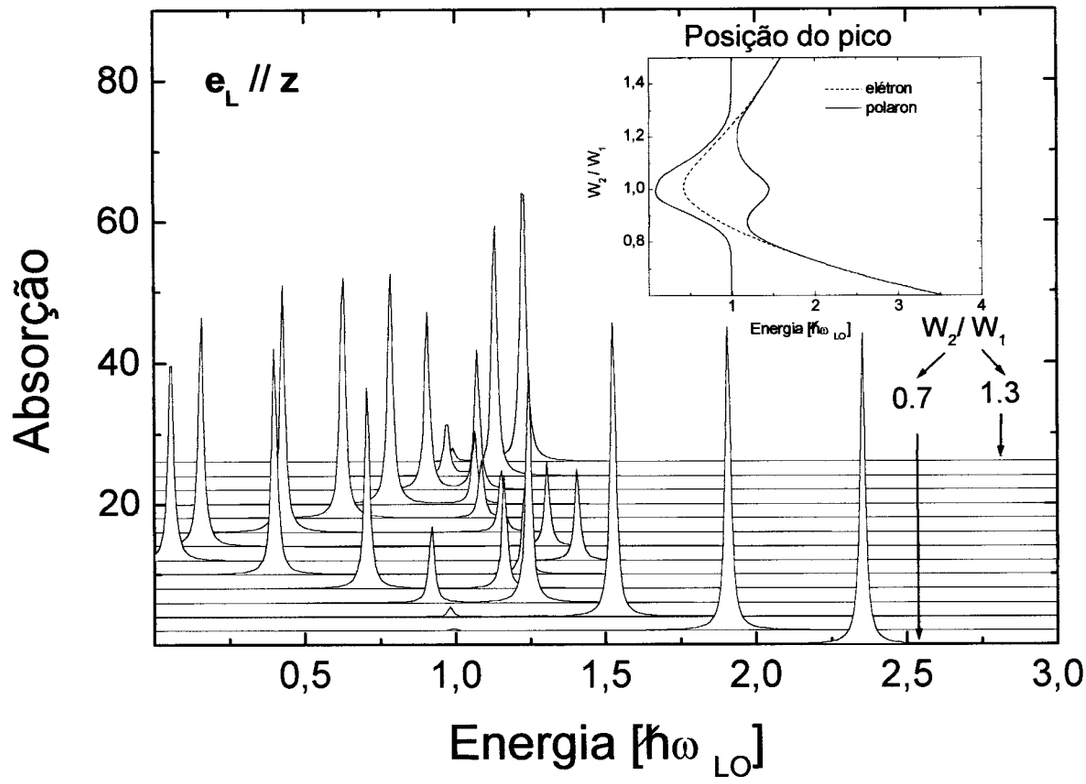


Figura 3.6: Espectro de absorção com $e_L//z$ para diferentes tamanhos relativos dos pontos quânticos $W_2/W_1$. As diferentes curvas no quadro apresentam uma separação $\Delta\left(W_2/W_1\right) = 0,046$. O quadro inserido mostra a posição dos picos de absorção. A linha tracejada representa a posição das transições ópticas permitidas para elétron sem interação.

## 3.6 Conclusão

Estudamos os efeitos da interação elétron-fônon LO em dois pontos quânticos acoplados compostos de $InAs/AlInAs$. O acoplamento elétron-fônon é considerado através de uma aproximação auto-consistente. O tamanho relativo do ponto quântico aparece como um fator dominante no tunelamento ressonante assistido por fônons. A redistribuição da densidade de carga pode ocorrer para certos estados eletrônicos em pontos quânticos acoplados devido ao tunelamento assistido por fônons, tornando em canais para a hibridização entre níveis de energia dos pontos quânticos. O estado fundamental é fortemente afetado para temperatura finita devido à absorção efetiva de fônon virtual.

A hibridização do orbital eletrônico afeta fortemente a resposta óptica do sistema, levando a uma regra de seleção para a relaxação próximo da ressonância. A resposta óptica em configurações complementares pode ajudar-nos a entender as modificações topológicas nos orbitais que ocorrem através do tunelamento induzido por fônons entre os pontos quânticos.

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

# Capítulo 4

# Efeito polarônico na densidade de estados em pontos quânticos

## 4.1 Introdução

Neste capítulo estudaremos os níveis de energia e a densidade de estados de um elétron acoplado com os fônons LO em um ponto quântico. Nós descrevemos o ponto quântico teoricamente por dois potenciais parabólicos, com diferentes confinamentos para as direções $x$ e $y$ e um potencial de um poço quântico simples finito na direção $z$.

Na literatura, a densidade de estados (ou função densidade espectral) do polaron (acoplamento elétron-fônon LO) em pontos quânticos obtida pelo método da função de Green, é uma função contínua em relação a energia, para uma temperatura finita. Por outro lado, a densidade espectral obtida por um método não-pertubativo resulta em um espectro discreto composto por uma série de funções delta de Dirac. O principal argumento é seguinte: visto que o sistema composto de estados eletrônicos é discreto em pontos quânticos, a densidade de estados do sistema composto pelo elétron interagindo com fônons LO, com frequência constante (modelo de Einstein), deve possuir uma estrutura similar. Então, o espectro de energia para o caso do polaron em pontos quânticos resultaria também em uma série de funções delta de Dirac para a densidade de estados. Stauber e seus colaboradores [61] argumentaram que o método da

função de Green é incapaz de reproduzir uma densidade espectral discreta que está relacionada à natureza não-contínua dos níveis de energia.

Na verdade, o problema da interação elétron-fonon LO para um elétron localizado num único estado eletrônico ("the independent Boson model" [58]) pode ser resolvido exatamente. Este modelo resulta em uma densidade espectral discreta para baixas temperaturas e para um forte acoplamento elétron-fônon LO ($\alpha >> 1$). Ultimamente, este modelo foi extendido para um sistema com interação elétron-fonon LO num ponto quântico com dois níveis eletrônicos, mas foram apresentados resultados da função espectral apenas para o estado fundamental e para altos valores de temperatura e acoplamento elétron-fônon LO fraco ($\alpha = 0.07$).

Neste capítulo, estudaremos a função densidade espectral do elétron em pontos quânticos. Queremos investigar qual a diferença fundamental entre os dois modelos, a função de Green e a solução através do método não-perturbativo, que levam a divergências no resultado da densidade espectral.

Apresentamos um estudo comparativo com os dois métodos citados e além disso, estudamos a densidade espectral do polaron num regime de temperatura baixa e acoplamento elétron-fonon LO forte utilizando o método não-pertubativo.

## 4.2 O modelo não-perturbativo

Nesta seção, tratamos a interação elétron-fônon LO num ponto quântico simples considerando dois níveis eletrônicos. Neste regime, o modelo não-perturbativo resulta numa solução exata para o problema do polaron localizado.

O Hamiltoniano do sistema para os dois estados eletrônicos discretos com energias $\epsilon_0 = 0$ e $\epsilon_1 = \Omega_x$, acoplados com $M$ modos de fônons LO com vetores de onda $\vec{q}_1, ..., \vec{q}_M$ e com

energia igual a $\hbar\omega_{LO}$ é dado por

$$H = \epsilon_0 c_0^\dagger c_0 + \epsilon_1 c_1^\dagger c_1 + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{LO} b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}} + \sum_{i,j=0,1;\vec{q}} M_{ij}(\vec{q}) \left(b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^\dagger\right) \left(c_i^\dagger c_j\right) \tag{4.1}$$

onde $c_i^\dagger$ e $c_i$ são respectivamente os operadores de criação e destruição de elétrons e $b_{\vec{q}}^\dagger$ e $b_{\vec{q}}$ são os operadores de criação e destruição de fônons. A matriz de interação elétron-fônon LO dada pela expressão (1.21) é $M_{ij} = V(q) \langle i| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |j\rangle = V(q) \langle n_x n_y l| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |n_x' n_y' l'\rangle$. O termo $V(q)$ é o potencial de acoplamento da interação elétron-fônon, que para o caso dos fônons LO foi mostrado na Eq. (1.18). Usamos unidades $\hbar = \omega_{LO} = m^* = 1$. Feito isto o potencial de acoplamento, $V(q)$, depende apenas da constante de Fröhlich $\alpha$. Vamos representar a freqüência de confinamento adimensional por $\Omega_x$ simplesmente.

Com base no procedimento de ortogonalização de Gram-Schmidt [67] utiliza-se uma combinação linear de operadores $b_{\vec{q}}$ escritos como $A_\xi$, onde $\xi = 1, 2..., M$, assim temos

$$\tilde{B}_\xi = A_\xi - \sum_{\vartheta=1}^{\xi-1} \left[A_\xi, B_\vartheta^\dagger\right] B_\vartheta, \quad B_\xi = \frac{\tilde{B}_\xi}{\sqrt{\left[\tilde{B}_\xi, \tilde{B}_\xi^\dagger\right]}}. \tag{4.2}$$

Os novos operadores $B_\xi$ e $B_{\xi'}^\dagger$ obedecem relações de comutação canônicas de bósons. O número de modos bosônicos que acoplam com $N$ estados femiônicos no espaço de Hilbert são apenas $\frac{N(N+1)}{2}$. Escolhendo a combinação linear $A_\xi^{(i,j)} = \sum_{\vec{q}} M_{ij}(\vec{q}) b_{\vec{q}}$, onde $\xi(i,j)$ representa o índice de soma sobre $\frac{N(N+1)}{2}$ pares $(i,j)$ com $i \geq j$. A escolha de $A_\xi^{(i,j)}$ pode ser arbitrária desde que as escolhas sejam linearmente independentes. A sequência $\xi(i,j)$ dos novos operadores bosônicos é o índice dos modos de interação elétron-fônon mapeados através de $A_\xi^{(i,j)}$.

O Hamiltoniano pode ser escrito da seguinte forma [61]

$$H = (\epsilon_0 - E_p^{(\mathcal{N})}) c_0^\dagger c_0 + (\tilde{\epsilon}_1^{(\mathcal{N})} - E_p^{(\mathcal{N})}) c_1^\dagger c_1 + B_1^\dagger B_1 + \mathcal{B}_2^\dagger \mathcal{B}_2 + \mathcal{B}_3^\dagger \mathcal{B}_3 +$$

$$+ \left(C_1 B_1 + C_1^* B_1^\dagger\right) \left(c_1^\dagger c_0 + c_0^\dagger c_1\right), \tag{4.3}$$

onde

$$\mathcal{B}_2 = B_2 - \eta\mathcal{N} + \gamma c_1^\dagger c_1, \quad \mathcal{B}_3 = B_3 - \kappa\mathcal{N} \tag{4.4}$$

com $\mathcal{N} = c_0^\dagger c_0 + c_1^\dagger c_1$ (operador número de partículas). As constantes que aparecem nas expressões (4.4), (4.5) e (4.6) são: $\gamma^2 = |C_5 - C_3|^2 + |C_6|^2$, $\eta = \frac{C_3^*(C_3 - C_5)}{\gamma}$ e $\kappa = \frac{C_3^* C_6^*}{\gamma}$. As constantes $C_i$ estão relacionadas ao acoplamento elétron-fônon LO, obtidas a partir do elemento de matriz desta interação e as suas expressões são mostradas na segunda seção do apêndice.

As energias que aparecem na expressão (4.3) são

$$\tilde{\epsilon}_1^{(\mathcal{N})} = \epsilon_1 + 2\,\mathrm{Re}(\gamma\eta^*)\mathcal{N} - \gamma \tag{4.5}$$

e

$$E_p^{(\mathcal{N})} = \left(|\eta|^2 + |\kappa|^2\right)\mathcal{N}. \tag{4.6}$$

A expressão (4.5) é a energia do primeiro nível renormalizado e depende do número de partículas e a expressão (4.6) é a energia devido ao efeito polarônico.

Os operadores $\mathcal{B}_2$ e $\mathcal{B}_3$ são operadores que dependem de $B_2$ e $B_3$ e estão deslocados destes operadores pelas quantidades descritas na expressão (4.4). Os números de fônons $n_1$, $n_2$ e $n_3$ possuem bases que descrevem osciladores harmônicos deslocados.

Os auto-estados dos fônons são representados pelos operadores de oscilador harmônico deslocados (denominados estados coerentes)

$$|n_\lambda\rangle_\xi \equiv (n_\lambda!)^{-1/2}\left(B_\lambda^\dagger - \xi\right)^{n_\lambda}|0\rangle_\xi^\lambda, \tag{4.7}$$

onde o vácuo dos fônons é definido por $(B_\lambda + \xi)\,|0\rangle_\xi^\lambda$ com

$$|0\rangle_\xi = |\xi\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}|\xi|^2}\frac{\xi^m}{\sqrt{m!}}\,|m\rangle\,. \tag{4.8}$$

Os estados coerentes possuem a seguinte propriedade: ${}_{\xi}\langle n_\lambda | n'_\lambda \rangle_{\xi+\gamma} = {}_{0}\langle n_\lambda | n'_\lambda \rangle_{\gamma}$, onde quando $\gamma = 0$ temos que ${}_{0}\langle n_\lambda | n'_\lambda \rangle_{0} = \delta_{n_\lambda, n'_\lambda}$.

Podemos decompor o espaço de Hilbert em três subespaços pois o Hamiltoniano conserva o número de elétrons visto que $[H, \mathcal{N}] = 0$. As constantes $\gamma$, $\eta$, $\kappa$ e $C_1$ estão relacionadas à intensidade do acoplamento elétron-fônon LO no ponto quântico. Elas renormalizam as energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado. No subespaço $N = 1$, a energia do estado fundamental tem seu valor subtraído pela quantidade $E_p^{(1)}$. A energia do primeiro estado excitado sofre uma renormalização de seu valor inicial e é subtraída da quantidade $E_p^{(1)}$. A Fig. 4.1 (a) mostra como as constantes $\gamma$, $\eta$, $\kappa$ e $C_1$ variam em função da frequência de confinamento adimensional $\Omega_x$ e a Fig. 4.1 (b) mostra a renormalização da energia do estado fundamental $\epsilon_0 - E_p^1$, e para o primeiro estado excitado $\tilde{\epsilon}_1^1 - E_p^1$ no subespaço $N = 1$.

As constantes relacionadas com a interação elétron-fônon LO possuem uma dependência linear com a constante de acoplamento de Fröhlich $\sqrt{\alpha}$. Podemos ver do apêndice (seção 2) que as constantes $C_i$ dependem do elemento de matriz da interação elétron-fônon LO e este por sua vez, tem uma dependência linear com $\alpha$, desta maneira as constantes $\eta$, $\gamma, \kappa$ e $C_1$, também serão proporcionais a $\sqrt{\alpha}$. As energias $\epsilon_0 - E_p^{\mathcal{N}}$, $\tilde{\epsilon}_1^{\mathcal{N}} - E_p^{\mathcal{N}}$ possuem uma dependência com $\alpha$.

### 4.2.1 Diagonalização exata

O Hamiltoniano (4.3) pode ser resolvido exatamente. Usamos as seguintes bases para os estados eletrônicos $|1\rangle = |V\rangle = |0,0\rangle$, $|2\rangle = c_0^\dagger |V\rangle = |1,0\rangle$, $|3\rangle = c_1^\dagger |V\rangle = |0,1\rangle$ e $|4\rangle = c_1^\dagger c_0^\dagger |V\rangle = |1,1\rangle$, onde $|V\rangle$ é o vácuo de elétrons. E para os fônons, usamos as bases $|\{n_1\}\rangle_0$, $|\{n_2\}\rangle_\lambda$ e $|\{n_3\}\rangle_\zeta$ para os três modos considerados. A base completa, combinando elétron e fônons, pode ser escrita como $|\phi_\alpha\rangle = |N_0, N_1; n_1, n_2, n_3\rangle = |N_0\rangle^0 |N_1\rangle^1 |n_1\rangle_0 |n_2\rangle_\lambda |n_3\rangle_\zeta$ onde $N_0, N_1 = 0, 1$, $n_1$, $n_2$, $n_3 = 0, 1, 2, ...n_{\max}$ com $n_{\max}$ o número de fônons suficinente para fazer convergir os cálcuos númericos e $\lambda$ e $\zeta$ são os deslocamentos do oscilador harmônico para $n_2$ e $n_3$.

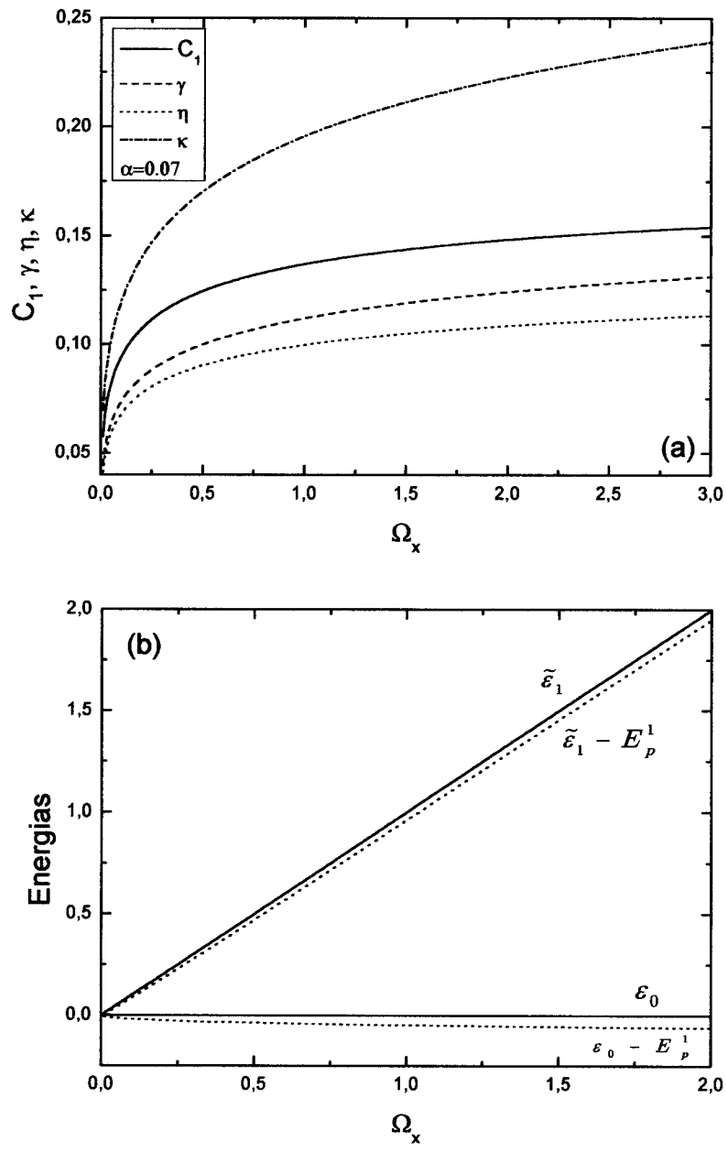


Figura 4.1: (a) Constantes $C_1$, $\gamma$, $\eta$ e $\kappa$ como função da freqüência adimensional de confinamento $\Omega_x$. (b) Níveis de energia $\epsilon_0$ e $\epsilon_1$ renormalizados pelo efeito da interação elétron fônon LO e deslocados pela quantidade igual a energia polarônica no subespaço $N = 1$.

O elemento de matriz calculado a partir do Hamiltoniano (4.3) e utilizando as bases $|\phi_\alpha\rangle$, é

$$H_{\alpha,\alpha'} = {}_\zeta\langle n_3|\ {}_\lambda\langle n_2|\ {}_0\langle n_1|_1\langle N_2|\ {}_0\langle N_1|\, H\, |N_1\rangle_0 |N_2\rangle_1 |n_1\rangle_0 |n_2\rangle_\lambda |n_3\rangle_\zeta\,. \tag{4.9}$$

Queremos diagonalizar o Hamiltoniano (4.3). As bases originais $|\phi_\alpha\rangle$ podem ser utilizadas para escrevermos as bases diagonais. Então vamos escrever as bases diagonais como uma combinação linear das bases $|\phi_\alpha\rangle$ da seguinte forma: $|\psi_\beta\rangle = \sum_\alpha a_{\beta,\alpha}|\phi_\alpha\rangle$, onde $\beta = 1, 2, ...4n^3_{\max} - 1, 4n^3_{\max}$, ou explicitamente $|\psi_\beta\rangle = \sum_\alpha a_{\beta,\alpha}|N_0, N_1; n_1, n_2, n_3\rangle$. As autoenergias serão obtidas da solução da seguinte expressão

$$\sum_\alpha (H_{\alpha,\alpha'} - E_\beta \delta_{\alpha,\alpha'}) a_{\beta,\alpha} = 0, \text{ para } \alpha' = 1, 2, ...4n^3_{\max} - 1, 4n^3_{\max}. \tag{4.10}$$

A matriz nos sub-espaços $N = 0$ e $N = 2$ é diagonal e no subespaço $N = 1$ apresenta blocos quadrados não-diagonais.

No espaço de Hilbert de $N = 0$, a matriz é diagonal usando a base $|\phi_{\alpha_1}\rangle = |0, 0; n_1, n_2, n_3\rangle \equiv |V\rangle |n_1\rangle_0 |n_2\rangle_0 |n_3\rangle_0$. Os auto-estados serão representados por $|\psi_{\beta_1}\rangle = \delta_{\beta_1,\alpha_1} |0\rangle^0 |0\rangle^1 |n_1\rangle_0 |n_2\rangle_0 |n_3\rangle_0$ onde $\beta_1 = 1, 2, ..., n^3_{\max}$. Os auto-valores de energia são dados por

$$E_{\beta_1} = n_1 + n_2 + n_3. \tag{4.11}$$

No subespaço $N = 2$, a matriz é diagonal usando a base $|\phi_{\alpha_4}\rangle = |1, 1; n_1, n_2, n_3\rangle \equiv c_1^\dagger c_0^\dagger |V\rangle |n_1\rangle_0 |n_2\rangle_{-2\eta+\gamma} |n_3\rangle_{-2\kappa}$. E agora, os auto-estados são $|\psi_{\beta_4}\rangle = \delta_{\beta_4,\alpha_4} |1\rangle^0 |1\rangle^1 |n_1\rangle_0 |n_2\rangle_{-2\eta+\gamma}$ $|n_3\rangle_{-2\kappa}$ dados por onde $\beta_4 = 1, 2, ..., n^3_{\max}$. Os autovalores correspondentes são

$$E_{\beta_4} = \epsilon_0 + \tilde{\epsilon}_1^{(2)} - E_p^{(2)} + n_1 + n_2 + n_3. \tag{4.12}$$

Para o sub-espaço de $N = 1$, a solução é mais complicada devido aos termos cruzados que relacionam transições entre os dois níveis eletrônicos de energia e adiciona um acoplamento

ressonante do polaron. Isto ocorre pois o elétron no primeiro estado excitado pode decair para o estado fundamental emitindo um fônon, ou saltar para o primeiro estado excitado absorvendo um fônon. Para este subespaço podemos usar as bases

$$\left|\phi_{\alpha_2}\right\rangle = \left|1,0;n_1,n_2,n_3\right\rangle \equiv c_0^\dagger \left|V\right\rangle \left|n_1\right\rangle_0 \left|n_2\right\rangle_{-\eta} \left|n_3\right\rangle_{-\kappa} \tag{4.13}$$

e

$$\left|\phi_{\alpha_3}\right\rangle = \left|0,1;n_1,n_2,n_3\right\rangle \equiv c_1^\dagger \left|V\right\rangle \left|n_1\right\rangle_0 \left|n_2\right\rangle_{-\eta+\gamma} \left|n_3\right\rangle_{-\kappa}. \tag{4.14}$$

Com os autovalores de energia obtidos a partir da diagonalzação da matriz neste subespaço.

O elemento de matriz $H_{\alpha,\alpha'}$ pode ser escrito como

$$H_{\alpha_1,\alpha_1} = (n_1+n_2+n_3)\,\delta_{n_1',n_1}\delta_{n_2',n_2}\delta_{n_3',n_3} \tag{4.15}$$

e

$$H_{\alpha_4,\alpha_4} = \left(\epsilon_0 + \tilde{\epsilon}_1^{(2)} - E_P^{(2)} + n_1 + n_2 + n_3\right)\delta_{n_1',n_1}\delta_{n_2',n_2}\delta_{n_3',n_3}, \tag{4.16}$$

para os termos diagonais da matriz e

$$\begin{aligned} H_{\alpha_{2,3},\alpha_{2,3}} &= \left(N_1\epsilon_0 + N_2\tilde{\epsilon}_1^{(1)} - E_P^{(1)} + n_1 + n_2 + n_3\right)\delta_{n_1',n_1}\delta_{n_2',n_2}\delta_{n_3',n_3}\delta_{N_1',N_1}\delta_{N_2',N_2} + \\ &+\delta_{n_3',n_3}\left[{}_\gamma\langle n_2'|\,n_2\rangle_0\left(\delta_{n_1',n_1+1}\sqrt{n_1+1}C_1^* + \delta_{n_1',n_1-1}\sqrt{n_1}C_1\right)\delta_{N_1,1}\delta_{N_2,0}\delta_{N_1',0}\delta_{N_2',1} + \right. \\ &+ \left.{}_0\langle n_2'|\,n_2\rangle_\gamma\left(\delta_{n_1',n_1+1}\sqrt{n_1+1}C_1^* + \delta_{n_1',n_1-1}\sqrt{n_1}C_1\right)\delta_{N_1,0}\delta_{N_2,1}\delta_{N_1',1}\delta_{N_2',0}\right]. \end{aligned} \tag{4.17}$$

para o subespaço $N = 1$ não diagonal. Neste sub-espaço a matriz é 2x2 para o elétron, o segundo e o terceiro termo da equação acima são os elementos não-diagonais em $N_1$ e $N_2$.

Podemos ver facilmente, da equação acima, que no sub-espaco de $|n_3\rangle$ a matriz é diagonal. Resolvemos a matriz no sub-espaço $N = 1$ para a seguinte base diagonal: $\left|\psi_{\beta_{23}}\right\rangle = \sum_{\alpha_2} a_{\beta_{23},\alpha_2}\left|1\right\rangle^0\left|0\right\rangle^1\left|n_1\right\rangle_0\left|n_2\right\rangle_{-\eta}\left|n_3\right\rangle_{-\kappa} + \sum_{\alpha_3} a_{\beta_{23},\alpha_3}\left|0\right\rangle^0\left|1\right\rangle^1\left|n_1\right\rangle_0\left|n_2\right\rangle_{-\eta+\gamma}\left|n_3\right\rangle_{-\kappa}$ onde $\beta_{23} = 1,2,\ldots 2n_{\max}^3$.

Os termos ${}_0\langle n|\, m\rangle_\gamma$ são denominados fatores de Franck-Condon e são determinados da seguinte forma

$$ {}_0\langle n|\, m\rangle_\gamma = {}_0\langle n| \frac{\left(b^\dagger - \gamma\right)^m}{\sqrt{m!}} |0\rangle_\gamma \tag{4.18} $$

com

$$ \left(b^\dagger - \gamma\right)^m |m'\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{m}{k} (-\gamma)^{m-k} \sqrt{\frac{(m'+k)!}{m'!}} |m'+k\rangle . \tag{4.19} $$

Subtituindo (4.19) e (4.8) em (4.18) temos

$$ {}_0\langle n|\, m\rangle_\gamma = \langle n| \frac{1}{\sqrt{m!}} \sum_{m'=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}|\gamma|^2} \frac{\gamma^{m'}}{\sqrt{m'!}} \sum_{k=0}^{\infty} \binom{m}{k} (-1)^{m-k} (\gamma)^{m-k} \sqrt{\frac{(m'+k)!}{m'!}} |m'+k\rangle . $$

Fazendo $l = m' + k$, temos

$$ \begin{aligned} {}_0\langle n|\, m\rangle_\gamma &= \frac{1}{\sqrt{m!}} e^{-\frac{1}{2}|\gamma|^2} \sum_{l-k=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\gamma^{l-k}}{\sqrt{(l-k)!}} \binom{m}{k} (-1)^{m-k} \gamma^{m-k} \sqrt{\frac{l!}{(l-k)!}} \langle n|\, l\rangle = \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\gamma|^2} \sum_{k=0}^{\min(n,m)} (-1)^{m-k} \gamma^{m-k} \gamma^{n-k} \frac{1}{\sqrt{m!}} \frac{\sqrt{n!}}{\sqrt{(n-k)!(n-k)!}} \binom{m}{k} \end{aligned} $$

que resulta em

$$ {}_0\langle n|\, m\rangle_\gamma = \frac{\gamma^{n+m}}{\sqrt{n!m!}} e^{-\frac{1}{2}|\gamma|^2} \sum_{k=0}^{\min(n,m)} (-1)^{m-k} \frac{1}{k!} \frac{n!}{(n-k)!} \frac{m!}{(m-k)!} \gamma^{-2k}. \tag{4.20} $$

Podemos simplificar o problema para o sub-espaço de um elétron através de uma aproximação. Para $N = 1$, o Hamiltoniano pode ser escrito de tal forma que apareçam apenas as transições ressonantes $0 \longrightarrow 1$ com absorção de um fônon e $1 \longrightarrow 0$ com a emissão de um fônon, o Hamiltoniano fica

$$ H^{RW} = \epsilon_0 c_0^\dagger c_0 + \epsilon_1 c_1^\dagger c_1 + B_1^\dagger B_1 + \mathcal{B}_2^\dagger \mathcal{B}_2 + \mathcal{B}_3^\dagger \mathcal{B}_3 + C_1 B_1 c_1^\dagger c_0 + C_1^* B_1^\dagger c_0^\dagger c_1 \tag{4.21} $$

obtido numa aproximação conhecida por "rotating-wave (RW)" tal como no modelo óptico Jaynes-Cummings [74]. O novo Hamiltoniano acima é representado por matrizes $2 \times 2$ nas

seguintes bases

$$
\begin{aligned}
|n_1, n_2\rangle^0 &\equiv c_0^\dagger |V\rangle |n_1\rangle_0 |n_2\rangle_{-\eta}, \\
|n_1, n_2\rangle^1 &\equiv c_1^\dagger |V\rangle |n_1 - 1\rangle_0 |n_2\rangle_{-\eta+\gamma}.
\end{aligned} \tag{4.22}
$$

A base diagonal é uma combinação das bases acima, dada por

$$
|n_1, n_2\rangle^\pm = c^\pm_{n_1,n_2} |n_1, n_2\rangle^0 \pm c^\mp_{n_1,n_2} |n_1, n_2\rangle^1 . \tag{4.23}
$$

Os correpondentes autovalores de energia são

$$
E^\pm_{n_1,n_2} = \frac{1}{2}(\epsilon_0 + \epsilon_1) + n_1 + n_2 - \frac{1}{2} \pm \frac{R_{n_1,n_2}}{2} \tag{4.24}
$$

onde o termo $R^2_{n_1,n_2} = \Delta^2 + 4n_1 \left| {}_0\langle n_2| \, n_2\rangle_\gamma C_1 \right|^2$ está relacionado ao acoplamento elétron-fônon LO e é conhecido como deslocamento de Rabi. Os coeficientes da expressão (4.23) são dados por $c^\pm_{n_1,n_2} = \left[\frac{(R_{n_1,n_2} \pm \Delta)}{2R_{n_1,n_2}}\right]^{\frac{1}{2}}$. Utilizamos este modelo simplificado como uma referência para os cálculos do modelo exato com o Hamiltoniano completo. Como este modelo é analítico, todos os cálculos são mais simples e resolvê-lo primeramente nos permite um resultado final mais rigoroso e confiável.

### 4.2.2 A função espectral

A função espectral do elétron é definida por

$$
A_{ij}(E) = \frac{1}{\pi} \mathrm{Re} \int_0^\infty dt e^{iEt} Tr \left\{ \rho \left[ c_i(t), c_j^\dagger(0) \right]_+ \right\} \tag{4.25}
$$

onde $\rho$ é a matriz densidade dada por $\rho = e^{-\frac{T_0}{T}(H-\mu\mathcal{N})}/Z$ com $T_0 = \hbar\omega_{LO}/k_B$, onde $k_B$ é a constante de Boltzmann, $\mu$ é a energia do potencial químico do sistema, $Z = Tr(e^{-\frac{T_0}{T}(H-\mu\mathcal{N})})$ é a normalização da matriz densidade e $c_i(t)$ é o operador de destruição de férmions dependente do tempo, dado por $c_i(t) = e^{Ht} c_i(0) e^{-Ht}$.

Escrevendo explicitamente os coeficientes presentes na base diagonal $|\psi_\beta\rangle = \sum_\alpha a_{\beta,\alpha} |\phi_\alpha\rangle$, como $a_{\beta,\alpha} = a_{\substack{N;n_1,n_2,n_3,\\ M;m_1,m_2,m_3}}$ podemos mostrar uma expressão para a função espectral. Todos os detalhes dos cálculos para chegar nas expressões abaixo estão na última seção do Apêndice.

Considerando o sistema com apenas um elétron, função espectral pode ser escrita como

$$\begin{aligned} A_0(E) &= \sum_{1;n_1,n_2,n_3} \sum_{2,3;n_1',n_2',n_3'} \left(\rho^1_{n_1,n_2,n_3} + \rho^{2,3}_{n_1',n_2',n_3'}\right) \left|\sum_{m_2} a_{\substack{2,3;n_1',n_2',\\ 2;n_1,m_2}} \, {}_0\langle n_2|\, m_2\rangle_{-\eta}\right|^2 \\ &\quad |{}_0\langle n_3|\, n_3'\rangle_\kappa|^2 \, \delta\left(\epsilon^{2,3}_{n_1',n_2',n_3'} - \epsilon^1_{n_1,n_2,n_3} - E\right) \end{aligned} \tag{4.26}$$

para o estado fundamental e

$$\begin{aligned} A_1(E) &= \sum_{1;n_1,n_2,n_3} \sum_{2,3;n_1',n_2',n_3'} \left(\rho^1_{n_1,n_2,n_3} + \rho^{2,3}_{n_1',n_2',n_3'}\right) \left|\sum_{m_2} a_{\substack{2,3;n_1',n_2',\\ 3;n_1,m_2}} \, {}_0\langle n_2|\, m_2\rangle_{-\eta+\gamma}\right|^2 \times \\ &\quad \times |{}_0\langle n_3|\, n_3'\rangle_\kappa|^2 \, \delta\left(\epsilon^{2,3}_{n_1',n_2',n_3'} - \epsilon^1_{n_1,n_2,n_3} - E\right) \end{aligned} \tag{4.27}$$

para o primeiro estado excitado. Onde os coeficientes $a_{\substack{N;n_1,n_2,n_3,\\ M;m_1,m_2,m_3}}$ estão com os índices de elétron e de fônon que efetivamente aparecem na diagonalização.

## 4.3 Resultados com o modelo não-perturbativo

A interação elétron-fônon LO modifica os níveis de energia do elétron. O estado fundamental e o primeiro estado excitado do sistema sofrem correção devido a renormalização causada pelo efeito polarônico. O estado fundamental do elétron sofre uma redução de seu valor original, no sub-espaço $N = 1$, por uma quantidade igual ao deslocamento de energia dado na equação (4.6), ou seja, $E_P^1$. A Fig. 4.2 mostra os níveis de energia de um elétron confinado em um ponto quântico simples, com estrutura que foi definida na introdução, um confinamento parabólico nas direções $x$ e $y$ com freqüências de confinamento $\Omega_x$ e $\Omega_y$ (considerando $\Omega_y = 1.5\Omega_x$) e um poço simples com largura $W$ (considerando $W = 100$Å) na direção $z$. Consideramos em nossos cálculos um ponto quântico composto de *GaAs-AlGaAs*, onde a constante de acoplamento de

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Fröhlich $\alpha = 0.07$. Para o GaAs a constante de temperatura $T_0$ é aproximadamente igual a 420 K.

A Fig. 4.2 mostra os autovalores que são solução da equação 4.10. O desdobramento dos níveis de energia está relacionado ao termo $B_1$ do Hamiltoniano. A intensidade do desdobramento é proporcional à constante $C_1$ e aos modos $n_1$ de fônons. O modo $n_2$ de fônons fornece um peso para o desdobramento dos níveis através dos fatores de Franck-Condon, como podemos verificar das equações 4.26 e 4.27. Os modos $n_2$ e $n_3$ fornecem acréscimos de energia aos dois níveis de energia do elétron. O número de níveis do sistema está relacionado à quantidade de fônons adicionado a ele. Observando a Fig. 4.2 verificamos que o estado fundamental permanece praticamento fixo com energia igual a $\epsilon_0 - E_P^1$, para $\alpha = 0.07$ temos que $E_p^1 \simeq -0.06$. Incluindo um grande número de fônons no sistema, as energias que surgem devido a estes fônons desdobram os níveis superiores mais vezes. Por exemplo, o estado fundamental acrescido da energia de um fônon acopla com o primeiro estado excitado. O primeiro estado excitado acrescido da energia de um fônon e o estado fundamental mais dois fônons acoplam também e assim por diante. Mas como existem mais de um modo de fônons, $n_2$ e $n_3$, os níveis desdobram mais a medida que mais fônons são adicionados. É interessante notar que se tivessemos um número maior de níveis de energia, o número de desbobramentos dos níveis devido a interação com os fônons aumentaria proporcionalmente. Os níveis mais altos sofreriam muitos desdobramento devido ao acoplamento com os níveis mais baixos acrescidos da energia dos fônons. Os desdobramentos mais altos poderiam chegar próximo de um contínuo de níveis de energia dependendo do número de fônons adicionados ao sistema.

A função espectral apresenta um aspecto que deve ser estudado com cautela. Observamos que os termos nas equações (4.26) e (4.27) ligados a $\rho^1_{n_1,n_2,n_3}$ correspondem à densidade de estados (possíveis estados de energia a serem ocupados pelo elétron) do sistema. Os termos

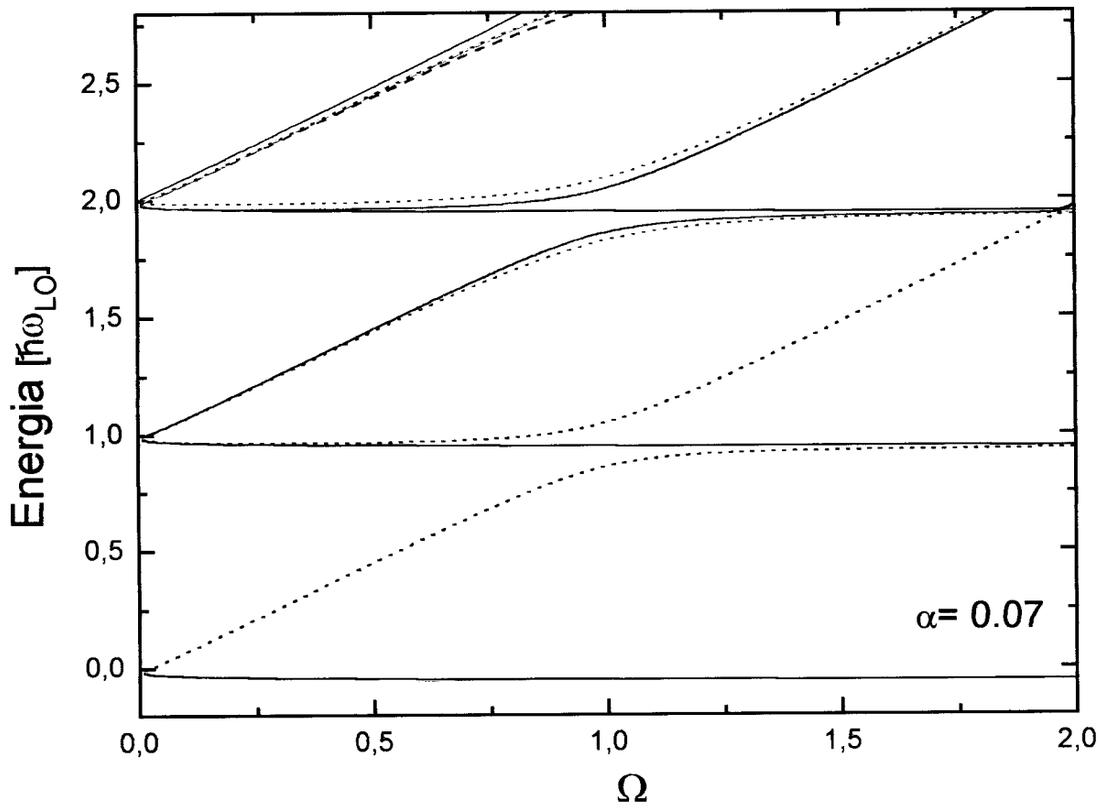


Figura 4.2: Níveis de energia do elétron acoplado com os fônons LO em função do confinamento lateral para um ponto quântico.

ligados a $\rho^{2,3}_{n_1,n_2,n_3}$ nestas equações correspondem à densidade espectral do elétron. O potencial químico afeta fortemente a função espectral. Nos cálculos, podemos considerar o "potencial químico" $\mu$ como um parâmetro. Quando $\mu$ é menor que o estado fundamental (que corresponde a um sistema sem elétron), identificamos que as equações (4.26) e (4.27) fornece a densidade de estados do estado fundamental e do primeiro estado excitado, respectivamente como mostrado na Fig. 4.3 (a) para vários valores de temperatura. Quando $\mu = (\epsilon_0 + \epsilon_1)/2$ os sistema está aproximadamente ocupado com um elétron. Este resultado é mostrado na Fig. 4.3 (b). Para um sistema exatamente ocupado por um elétron, precisamos fazer cálculos auto-consistentes para o potencial químico. A expressão para a função espectral é um conjunto de funções delta. Incluimos uma largura fictícia para os picos e para isso escolhemos um expressão gaussiana para a delta de Dirac, onde consideramos a variância gaussiana igual a 0.01 (adimensional em termos de $\hbar\omega_{LO}$).

Os picos da densidade de estados, na Fig. 4.3 (b), estão coerentes com o espectro de energia da Fig. 4.2. O estado fundamental tem seu valor renormalizado para $\epsilon_0 - E_p^1$ enquanto o primeiro estado excitado sofre um desdobramento em dois estados bem definidos devido à interação elétron-fônon LO. Mas, a medida que a temperatura aumenta, como podemos ver nas outras curvas das Figuras 4.3 (a) e (b), o potencial químico não representa mais um fator determinante e as duas situações, com os dois diferentes parâmetros para $\mu$, coincidem para temperaturas altas. Ou seja, quando o efeito dos fônons é mais intenso no sistema (temperaturas altas) a densidade de estados e a densidade espectral são praticamente as mesmas quantidades Físicas. Para temperaturas altas existe a possibilidade do elétron absorver um fônon e saltar para o primeiro estado excitado, desde que a energia do fônon seja coerente com a separação energética entre os dois níveis de energia.

A Fig. 4.4 mostra a densidade de estados do polaron com picos para o estado funda-

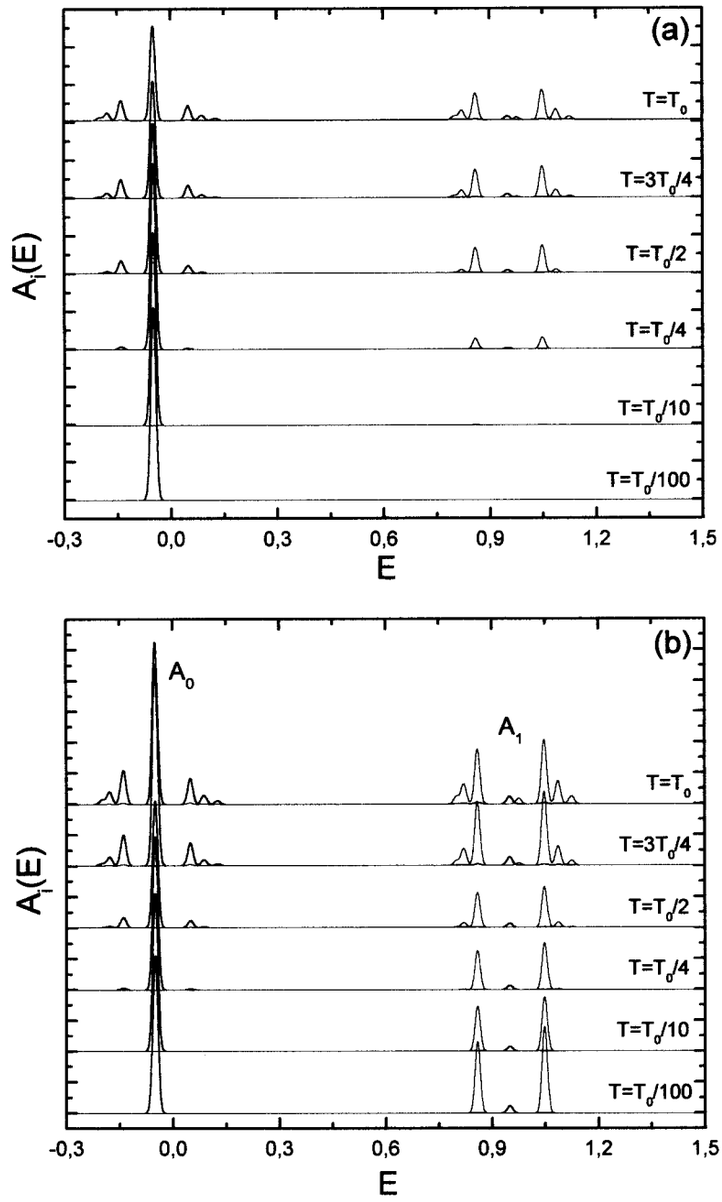


Figura 4.3: (a) Densidade espectral considerando o potencial químico igual a $(\epsilon_0 + \epsilon_1)/2$ e (b) Densidade de estados possíveis quando para a potencial químico possui uma energia inferior ao valor do estado fundamental renormalizado. Vários valores de temperatura são considerados.

mental e para o primeiro estado excitado. Consideramos uma temperatura próxima de zero, $T = T_0/100$ ($T \sim 4K$), e variamos o confinamento lateral. A densidade de estados, para temperatura zero apresenta picos de possíveis estados de energia a serem ocupados pelo elétron, visto que escolhemos o valor da energia do potencial químico abaixo do estado fundamental. Os picos estão em concordância com a Fig. 4.2. Podemos observar da Fig. 4.4 que o estado fundamental sofre uma pequena diminuição em seu valor de energia original, como discutido antes e não sofre grandes modificações para temperaturas muito baixas, a não ser este deslocamento de energia. Podemos observar que o pico do estado fundamental permanece praticamente no mesmo valor de energia mesmo quando variamos a freqüência de confinamento lateral. Isto ocorre por que o deslocamento polarônico $E_p^1$ varia muito pouco com a freqüência de confinamento $\Omega_x$ como podemos observar na Fig. 4.1 (b). O primeiro estado excitado sofre um desdobramento devido ao efeito da interação elétron-fônon LO. O nível de energia $\epsilon_1$ renormalizado se desdobra em dois níveis de energia bem definidos, como podemos ver na Fig. 4.4. Este desdobramento ocorre devido ao fato do primeiro estado excitado acoplar ressonantemente com o estado fundamental acrescido da energia de um fônon. Podemos observar este fenômeno através do "anticrossing" dos dois níveis de energia desdobrados que aparecem na Fig. 4.2, (linha pontilhada). Os pesos dos picos assumem valores muito próximos quando a freqüência de confinamento possui um valor igual a energia de um fônon, ou seja, na ressonância.

A Fig. 4.5 mostra a densidade espectral para vários valores de confinamento e para temperatura $T = 3T_0/4$ ($T \sim 315K$) e na Fig. 4.6 consideramos a temperatura $T = T_0/4$ ($T \sim 105K$). Aqui nós consideramos o potencial químico com um valor igual $(\epsilon_0 + \epsilon_1)/2$ pois queremos avaliar a densidade espectral, e para temperaturas altas o estado excitado surge com uma probabilidade de estar ocupado. As estruturas que surgem junto do pico principal do estado fundamental e dos dois picos do primeiro estado excitado são provenientes do termo de

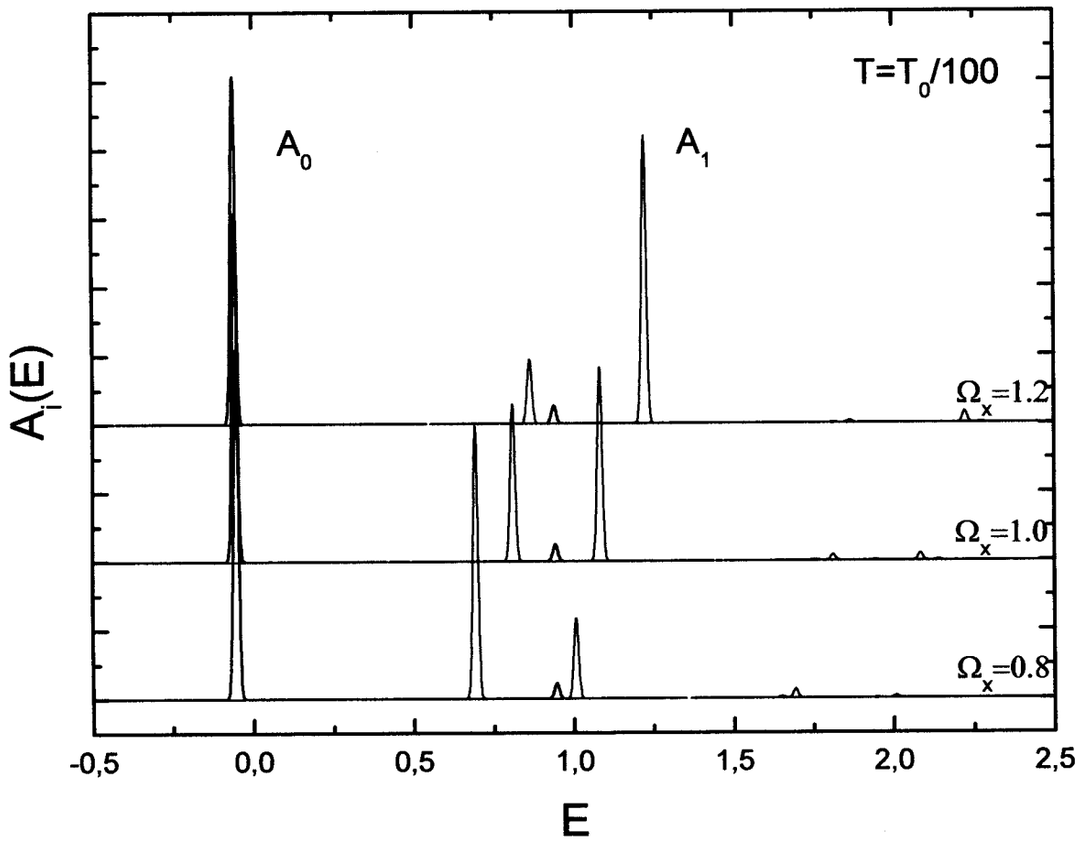


Figura 4.4: Densidade de estados possíves do polaron para sistema de dois níveis considerando vários valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. $T = T_0/100$.

transição do Hamiltoniano, que envolve o operador fonônico $B_1$ e a constante de acoplamento $C_1$, ou seja, os termos não-diagonais da matriz de autovalores no sub-espaço $N = 1$. Estes termos determinam os picos extras na densidade. Os picos menores que aparecem no lado direito e no lado esquerdo das Figs. 4.5 e 4.6 são réplicas de fônons que surgem devido aos modos de fônons $n_2$ e $n_3$. As réplicas tem uma estrutura muito parecida com a dos picos principais, para o estado fundamental e o primeiro estado excitado, mas possuem uma intensidade bem menor. No quadro da Fig. 4.5 mostramos as réplicas da esquerda e da direita relacionadas ao estado fundamental para $\Omega_x = 1.0$. As réplicas tem valores de energia iguais a um múltiplo inteiro da energia de um fônon LO. As réplicas de fônons do primeiro estado excitado seguem a mesma análise do estado fundamental.

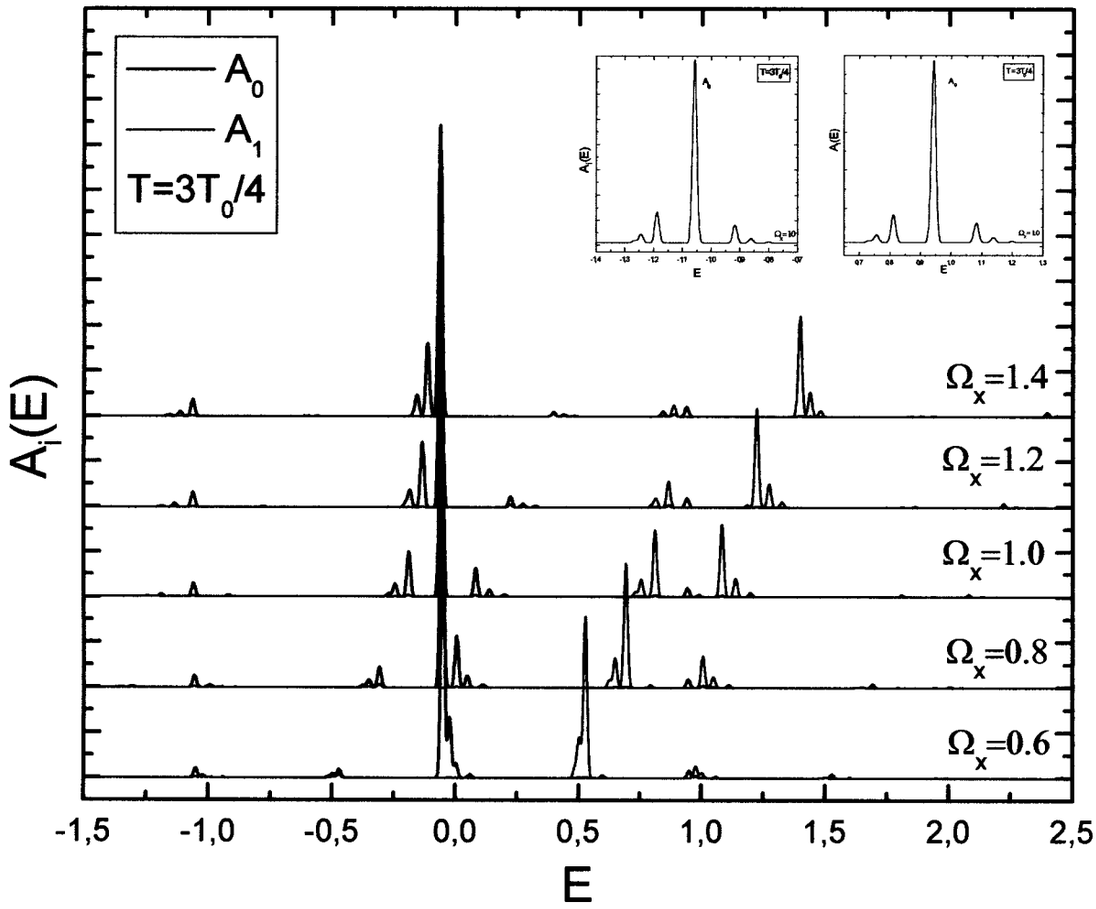


Figura 4.5: Densidade espectral para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado do polaron no ponto quântico considerando vários valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura considerada é $T = 3T_0/4$.

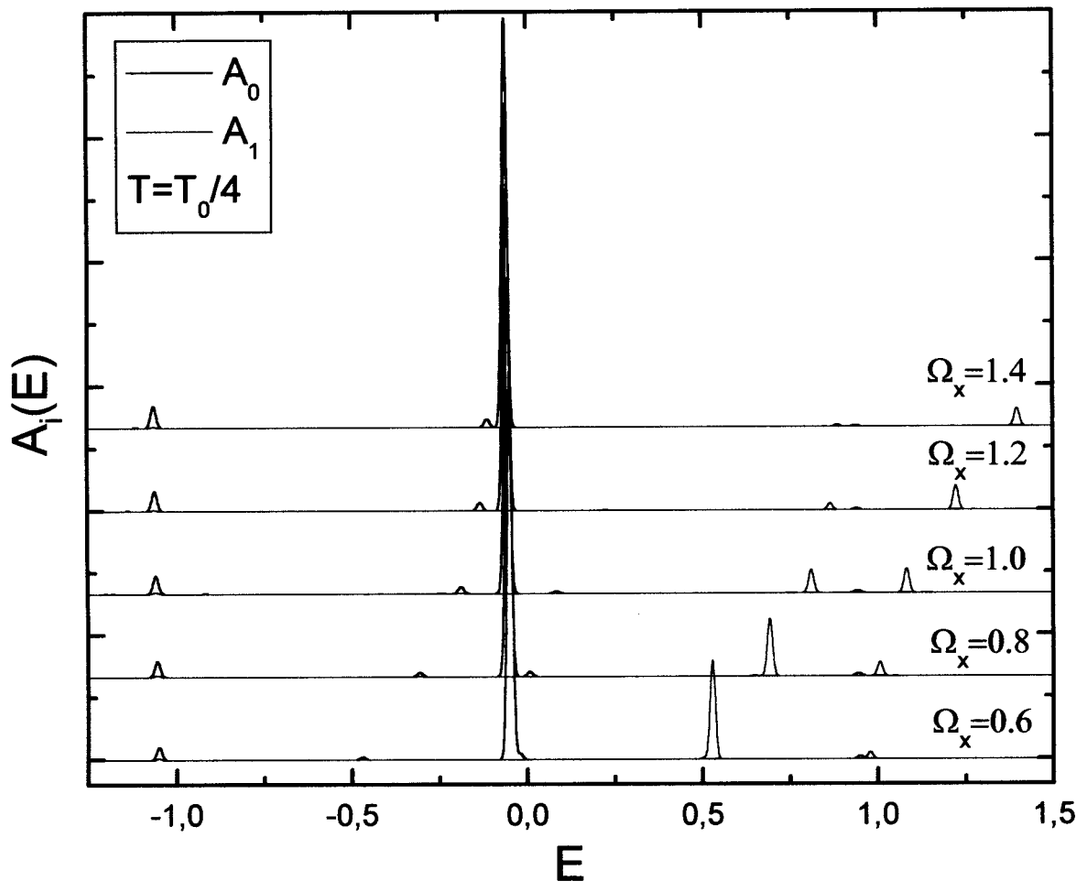


Figura 4.6: Densidade espectral para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado do polaron no ponto quântico considerando vários valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura considerada é $T = T_0/4$.

## 4.4 O modelo da função de Green

O outro modelo para a obtenção da função espectral do elétron confinado no ponto quântico e interagindo com o sistema de fônons é a função de Green. A função espectral $A_i(E)$ para um determinado nível de energia $i$ pode ser escrita da seguinte forma

$$A_i(E) = -\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\left[E - E_i - \Sigma_i(E)\right]^{-1} \tag{4.28}$$

ou

$$A_i(E) = -\frac{1}{\pi}\frac{\operatorname{Im}\Sigma_i(E)}{\left[E - E_i - \operatorname{Re}\Sigma_i(E)\right]^2 + \left[\operatorname{Im}\Sigma_i(E)\right]^2} \tag{4.29}$$

onde o termo $\Sigma_i(E)$ é a auto-energia do elétron e $E_i$ é a energia do i-ésimo nível de energia. A auto-energia do elétron por sua vez também depende da densidade espectral, o que nos fornece um cálculo auto-consistente para obtermos as duas funções.

A auto-energia pode ser escrita, para incluir os fônons LO, da seguinte maneira (os detalhes desta equação estão no Apêndice)

$$\Sigma_i(E) = \sum_j \sum_{\vec{q}} \left|M_{\vec{q}}^{ij}\right|^2 \int_{-\infty}^{\infty} ds A_j(s) \left[\frac{N_q + n_F(s)}{E + \hbar\omega_{LO} - s + i\delta} + \frac{N_q + 1 - n_F(s)}{E - \hbar\omega_{LO} - s + i\delta}\right] \tag{4.30}$$

onde $i$ e $j$ indicam os índices dos níveis do elétron no ponto quântico, $\omega_{LO}$ é a frequência do fônon com vetor de onda $\vec{q}$, $N_q$ é a função de distribuição dos bósons dada pela expressão $N_q = 1/\left(e^{\hbar\omega_{LO}/k_BT} - 1\right)$ e $n_F(s)$ é a função de distribuição de férmions dada por $n_F(s) = 1/\left(e^{s/k_BT} + 1\right)$.

Fazendo a auto-energia adimensional em termos da energia do fônon LO ($\hbar\omega_{LO}$) temos a seguinte expressão

$$\begin{aligned}\Sigma_i(E) &= \frac{1}{(\hbar\omega_{LO})^2}\sum_j \int_{-\infty}^{\infty} ds A_j(E)\left[\frac{N_q + n_F(s)}{E + 1 - s + i\delta} + \frac{N_q + 1 - n_F(s)}{E - 1 - s + i\delta}\right]\left(\sum_{\vec{q}}\left|M_{\vec{q}}^{ij}\right|^2\right) = \\ &= \operatorname{Im}\Sigma_i(E) + \operatorname{Re}\Sigma_i(E),\end{aligned} \tag{4.31}$$

onde

$$\begin{aligned}\sum_{\vec{q}}\left|M_{\vec{q}}^{ij}\right|^2 &= \sum_{\vec{q}}\left|M_{\vec{q}}^{ij}\right|^2 = \sum_{\vec{q}}\left|V(q)\right|^2\left|\langle i|\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\,|j\rangle\right|^2 = \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left|V(q)\right|^2\left|\langle i|\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\,|j\rangle\right|^2 dq_x dq_y dq_z = \\ &= \frac{\alpha\left(\hbar\omega_{LO}\right)^2}{2\pi^2}S_{ij} \qquad (4.32)\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}S_{ij} &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{r_p}{q^2}\left|\langle i|\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\,|j\rangle\right|^2 dq_x dq_y dq_z = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{r_p}{q^2}\left|\langle n_x, n_y, l|\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\,|n_x', n_y', l'\rangle\right|^2 dq_x dq_y dq_z. \qquad (4.33)\end{aligned}$$

A equação acima é a integral adimensional do quadrado do elemento de matriz, que pode ser calculado utilizando as expressões indicadas na introdução.

A expressão (4.31) pode ser escrita como

$$\begin{aligned}\Sigma_i(E) &= \frac{\alpha}{2\pi^2}\sum_j\int_{-\infty}^{\infty}dsA_j(E)\left[\left(N_q+n_F(s)\right)\left(\frac{E+1-s}{(E+1-s)^2+\delta^2}-i\frac{\delta}{(E+1-s)^2+\delta^2}\right)\right. \\ &\left.+\left(N_q+1-n_F(s)\right)\left(\frac{E-1-s}{(E-1-s)^2+\delta^2}-i\frac{\delta}{(E-1-s)^2+\delta^2}\right)\right]S_{ij}. \qquad (4.34)\end{aligned}$$

Separando as partes real e imaginária temos, utilizando o metódo de Kramers-Kroning, a seguinte expressão para parte imaginária da auto-energia, onde fizemos o limite $\delta \longrightarrow 0$

$$\operatorname{Im}\Sigma_i(E) = -\pi\sum_j\left[\left(N_q+n_F(E+1)\right)A_j(E+1)+\left(N_q+1-n_F(E-1)\right)A_j(E-1)\right]C_\alpha S_{ij} \qquad (4.35)$$

com $C_\alpha = \frac{\alpha}{2\pi^2}$.

A parte real da auto-energia, depois de alguns arranjos e fazendo também $\delta \longrightarrow 0$, pode ser escrita como

$$\operatorname{Re}\Sigma_i(E) = \sum_j\int_{-\infty}^{\infty}dsA_j(E)\left[\left(N_q+n_F(s)\right)\frac{1}{E+1-s}+\left(N_q+1-n_F(s)\right)\frac{1}{E-1-s}\right]\frac{\alpha}{2\pi^2}S_{ij}. \qquad (4.36)$$

Fazendo a seguinte transformação de variavéis: na primeira integral $s = E + 1 - \xi$ e na segunda $s = E + 1 - \xi$, e rearranjando os termos temos

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}\Sigma_i(E) &= -\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \Big\{-\pi\sum_j \left[\left(N_q + n_F(E+1-\xi)\right)A_j(E+1-\xi) + \right. \\
&\quad \left. + \left(N_q + 1 - n_F(E-1-\xi)\right)A_j(E-1-\xi)\right]C_\alpha S_{ij} \\
&\quad +\pi\sum_j \left[\left(N_q + n_F(E+1+\xi)\right)A_j(E+1+\xi)\right. \\
&\quad \left. + \left(N_q + +1 - n_F(E-1+\xi)\right)A_j(E-1+\xi)\right]C_\alpha S_{ij}\Big\}\frac{d\xi}{\xi}. \qquad (4.37)
\end{aligned}$$

Observe que

$$\begin{aligned}
&-\pi\sum_j \left[\left(N_q + n_F(E+1-\xi)\right)A_j(E+1-\xi) + \left(N_q + 1 - n_F(E-1-\xi)\right)A_j(E-1-\xi)\right]C_\alpha S_{i} \\
&= \operatorname{Im}\Sigma_i(E-\xi)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
&-\pi\sum_j \left[\left(N_q + n_F(E+1+\xi)\right)A_j(E+1+\xi) + \left(N_q + 1 - n_F(E-1+\xi)\right)A_j(E-1+\xi)\right]C_\alpha S_{i} \\
&= \operatorname{Im}\Sigma_i(E+\xi).
\end{aligned}$$

Substituindo essas duas expressões acima em (4.37) temos

$$\operatorname{Re}\Sigma_i(E) = -\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left[\operatorname{Im}\Sigma_i(E-\xi) - \operatorname{Im}\Sigma_i(E+\xi)\right]\frac{d\xi}{\xi}. \qquad (4.38)$$

Inicialmente, para realizarmos os cálculos da auto-energia, aproximamos a função espectral por uma função delta, que é a forma da densidade de estados eletrônica em um ponto quântico. Utilizamos a seguinte expressão inicial

$$A_i(E) = \delta(E - E_i) = \frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{(E-E_i)^2 + \epsilon^2}, \qquad (4.39)$$

no limite de $\epsilon \longrightarrow 0$ a expressão acima é uma delta de Dirac. Ajustamos a constante $\epsilon$ para nos fornecer um bom chute inicial para os cálculos. Utilizamos esta expressão para obter a

auto-energia e através de cálculos auto-consistentes obtermos a função espectral renormalizada que inclui a interação elétron-fônon LO.

Para compararmos os resultados do cálculo da função espectral obtidos através do método da função de Green com os resultados obtidos a partir do modelo exato, adicionamos a auto-energia mais um termo. O termo de Hartree considera uma densidade de carga eletrônica constante relacionada com o fundo positivo de cargas. A expressão para a energia de Hartree é

$$\Sigma_i^H(E) = -\frac{2}{\hbar\omega_{LO}} \sum_{j,\vec{q}} n_j M_{\vec{q}}^{(i,i)} M_{\vec{q}}^{(j,j)} \tag{4.40}$$

onde $n_j$ é o número de ocupação eletrônico dado por $n_j = \int_{-\infty}^{\infty} A_j(E) n_F(E) dE$ com $n_F$ a função de distribuição de Fermi. Podemos expressar a equação (4.40) de maneira similar a equação da auto-energia em (4.34). Os termos do elemento de matriz em (4.40) são calculados como

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{q}} M_{\vec{q}}^{(i,i)} M_{-\vec{q}}^{(j,j)} &= \sum_{\vec{q}} M_{\vec{q}}^{(i,i)} \left(M_{\vec{q}}^{(j,j)}\right)^* = \\ &= \sum_{\vec{q}} |V(q)|^2 \langle i| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |i\rangle \left(\langle j| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |j\rangle\right)^* \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{q}} M_{\vec{q}}^{(i,i)} M_{-\vec{q}}^{(j,j)} &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} |V(q)|^2 \langle i| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |i\rangle \left(\langle j| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |j\rangle\right)^* dq_x dq_y dq_z = \\ &= \frac{\alpha(\hbar\omega_{LO})^2}{2\pi^2} S_{ii;jj} \end{aligned} \tag{4.41}$$

com

$$S_{ii;jj} == \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{r_p}{q^2} \langle i| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |i\rangle \left(\langle j| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} |j\rangle\right)^* dq_x dq_y dq. \tag{4.42}$$

Substituistituindo as equações (4.41) e (4.42) em (4.40) temos

$$\begin{aligned} \Sigma_i^H(E) &= -\frac{2}{\hbar\omega_{LO}} \sum_j n_j \frac{\alpha(\hbar\omega_{LO})^2}{2\pi^2} S_{ii;jj} = \\ &= -\sum_j n_j \frac{\alpha\hbar\omega_{LO}}{\pi^2} S_{ii;jj}. \end{aligned}$$

Tornando a equação acima adimensional, temos

$$\Sigma_i^H(E) = -2C_\alpha \sum_j n_j S_{ii;jj}, \tag{4.43}$$

que é o termo de Hartree da auto-energia.

A Fig. 4.7 mostra o comportamento da integral da matriz de acoplamento da interação elétron-fônon LO como uma função da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A intensidade do acoplamento mostrada na figura foi calculado para o ponto quântico simples com largura $W = 100$Å na direção $z$ e um confinamento lateral anisotrópicos $\Omega_y = 1.5\Omega_x$. A intensidade do acoplamento aumenta com o aumento da freqüência de confinamento $\Omega_x$.

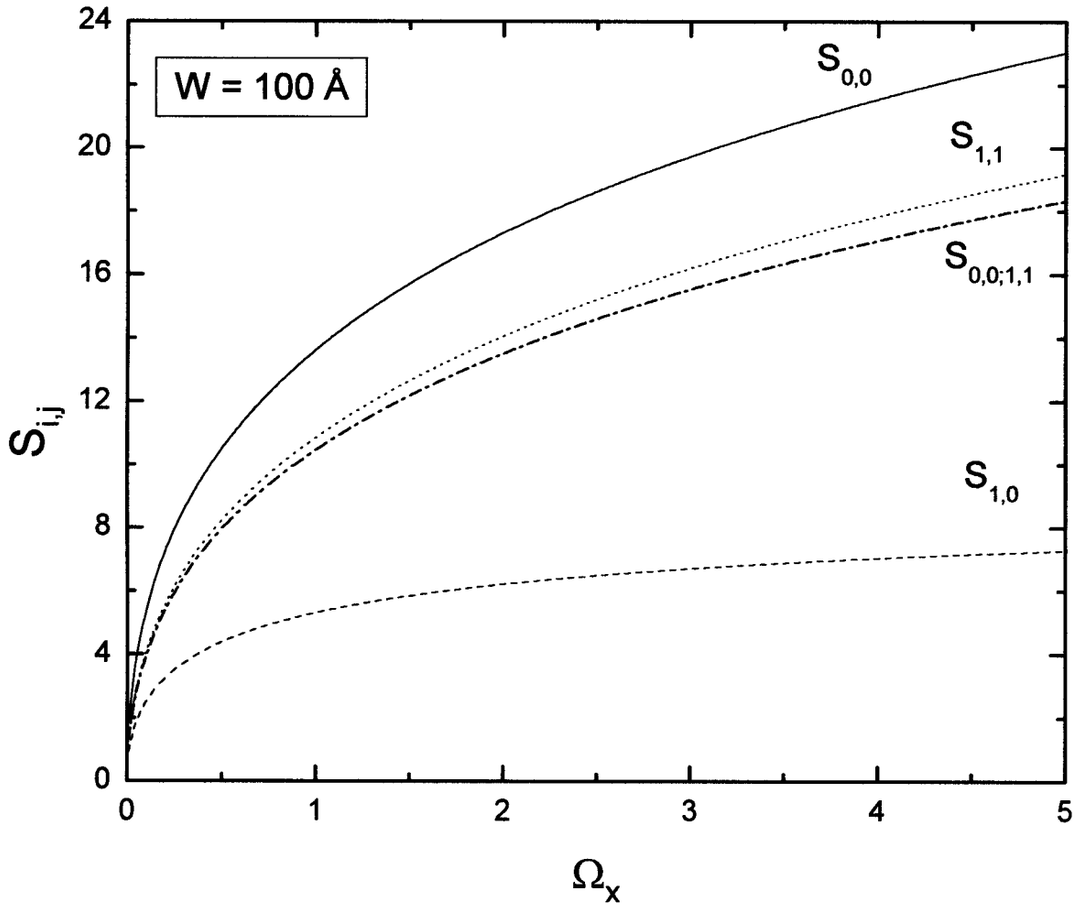


Figura 4.7: Intensidade da matriz de acoplamento elétron-fônon LO entre dois estados eletrônicos.

## 4.5 Resultados com função de Green

Em nossos cálculos consideramos apenas dois níveis de energia do elétron no ponto quântico. O método da função de Green permite incluir mais níveis de energia no sistema. Fizemos um cálculo comparativo, para uma estrutura simplificada, de dois níveis e de quatro níveis eletrônicos. Considerando um potencial isotrópico, $\Omega_x = \Omega_y = \Omega$ no plano $x$-$y$, e assumindo a largura na direção $z$ igual zero, obtendo assim um disco cilíndrico, podemos avaliar qual o efeito da inclusão de níveis de energia mais altos nos dois primeiros níveis considerados. Consideramos os níveis $(0,0)$, $(1,0)$, $(1,0)$ e $(1,1)$, fizemos cálculos para a densidade espectral dos dois níveis $(0,0)$, $(1,0)$, incluimos os níveis $(1,0)$ e $(1,1)$ e analizamos os resultados.

A Fig. 4.8 mostra os resultados da densidade espectral para os dois primeiros níveis de energia do disco cilíndrico (curva sólida) comparados com o resultado da densidade espectral quando incluimos mais dois níveis de energia (curva pontilhada). Como os nossos cálculos são realizados auto-consistentemente, a inclusão de mais níveis de energia deve renormalizar os níveis mais baixos. Observamos da figura que os efeitos qualitativos são pequenos o que nos permite tratar o sistema com apenas dois níveis sem grande perda de generalidade. Fizemos os cálculos para uma temperatura $T = T_0/4$.

Vamos considerar agora, um confinamento parabólico no plano $x$-$y$ com diferentes freqüências de confinamento nestas duas dimensões. Faremos isso para evitar que o terceiro nível de energia fique degenarado com o segundo. Consideraremos o confinamento anisotrópico parabólico em $x$ e $y$ com $\Omega_y = 1.5\Omega_x$ e o poço simples com largura $W = 100$ Å na direção $z$. A Fig. 4.9 mostra a densidade espectral para o elétron interagindo com os fônons LO em um ponto quântico de GaAs para os dois primeiros estados eletrônicos $(0,0,0)$ e $(1,0,0)$ em função de várias freqüências de confinamento lateral para uma temperatura $T = 3T_0/4$. Consideramos $\Omega_x$ variando de 0.6 a 1.4 com intervalos de 0.2 (os valores são adimensionais em termos da

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

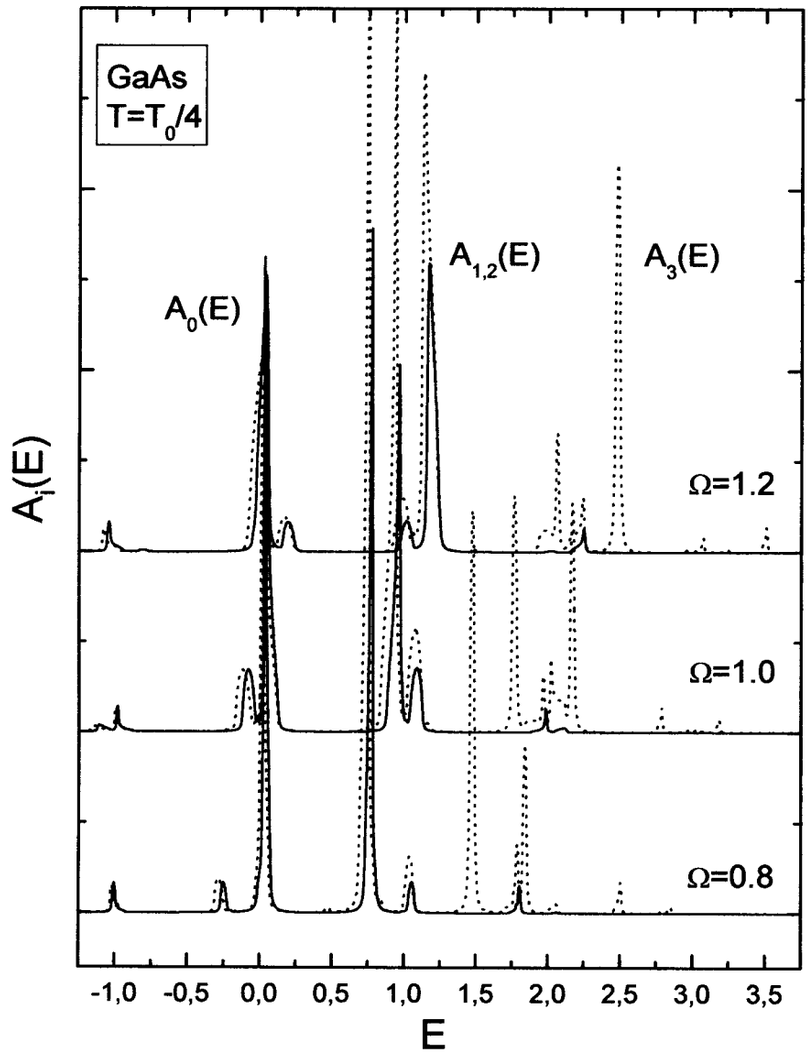


Figura 4.8: Comparação entre o resuldado da densidade espectral do elétron acoplado com os fônons LO em um disco cilíndrico considerando dois níveis de energia $(0,0,0)$ *e* $(1,0,0)$ (curva sólida) com o resultado para quatro níveis de energia $(0,0,0)$, $(1,0,0)$, $(0,1,0)$ e $(1,1,0)$ (curva pontilhada). Consideramos três valores da freqüência de confinamento $\Omega$.

freqüência dos fônons LO). O gráfico apresenta os picos da densidade espectral para os dois níveis de energia do elétron interagindo com os fônon LO. Os picos da densidade espectral possuem uma largura diferente de zero, ao contrário do resultado obtido com o método não-perturbativo, representado por funções delta de Dirac. A largura do pico está relacionada a parte imaginária da auto-energia. Variamos a freqüência de confinamento lateral e observamos o surgimento de picos relacionados à réplicas de fônons em valores de energias iguais a um múltiplo inteiro da energia de um fônon. A medida que aumentamos a freqüência de confinamento, as réplicas de fônons se aproximam da energia dos picos do estado fundamental e do primeiro estado excitado definindo o acoplamento, como pode ser visto da Fig. 4.9. Na ressonância, a separação de energia entre os dois estados é igual a energia de um fônon. O acoplamento ressonante provoca o desdobramento dos nívies de energia. Na presença da interação elétron-fônon LO os níveis de energia eletrônicos são deslocados, este efeito está relacionado a parte real da auto-energia. A Fig. 4.10 mostra o mesmo resultado para uma temperatura mais baixa, $T = T_0/4$. Nós podemos observar que temperaturas mais altas provocam um maior alargamento nos picos da densidade espectral.

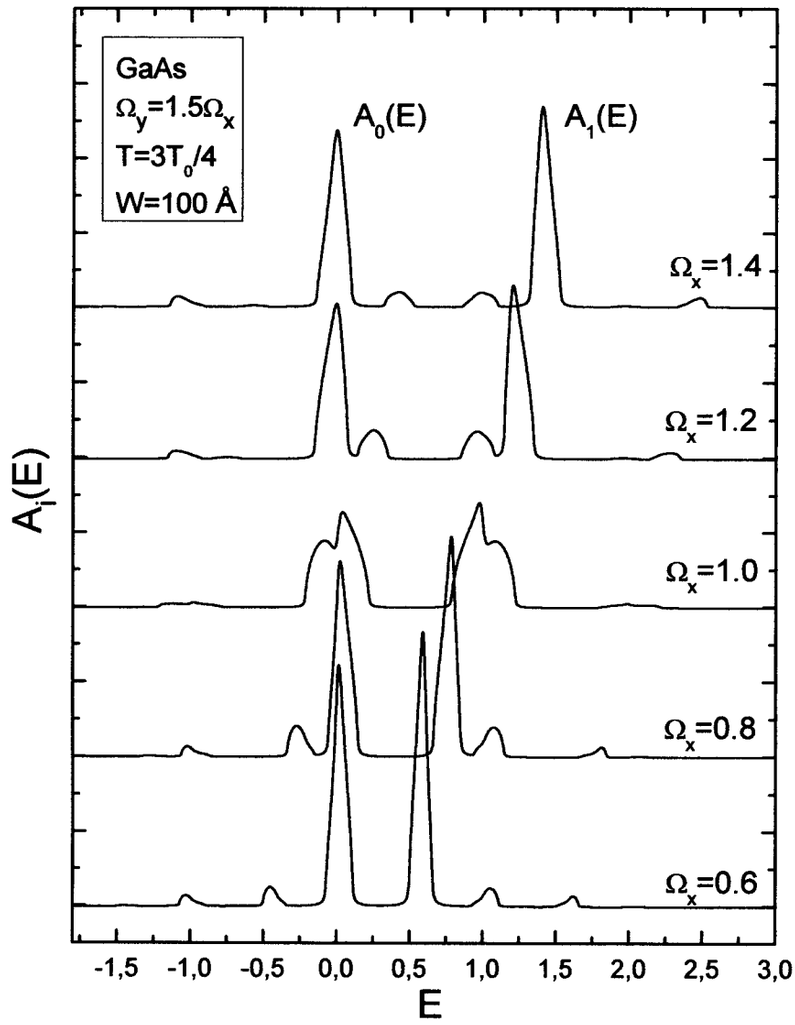


Figura 4.9: Densidade espectral do elétron acoplado com os fônons LO em um ponto quântico simples com largura $W = 100$Å na direção $z$ e um confinamento lateral anisotrópico $\Omega_y = 1.5\Omega_x$. Consideramos cinco valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura é $T = 3T_0/4$.

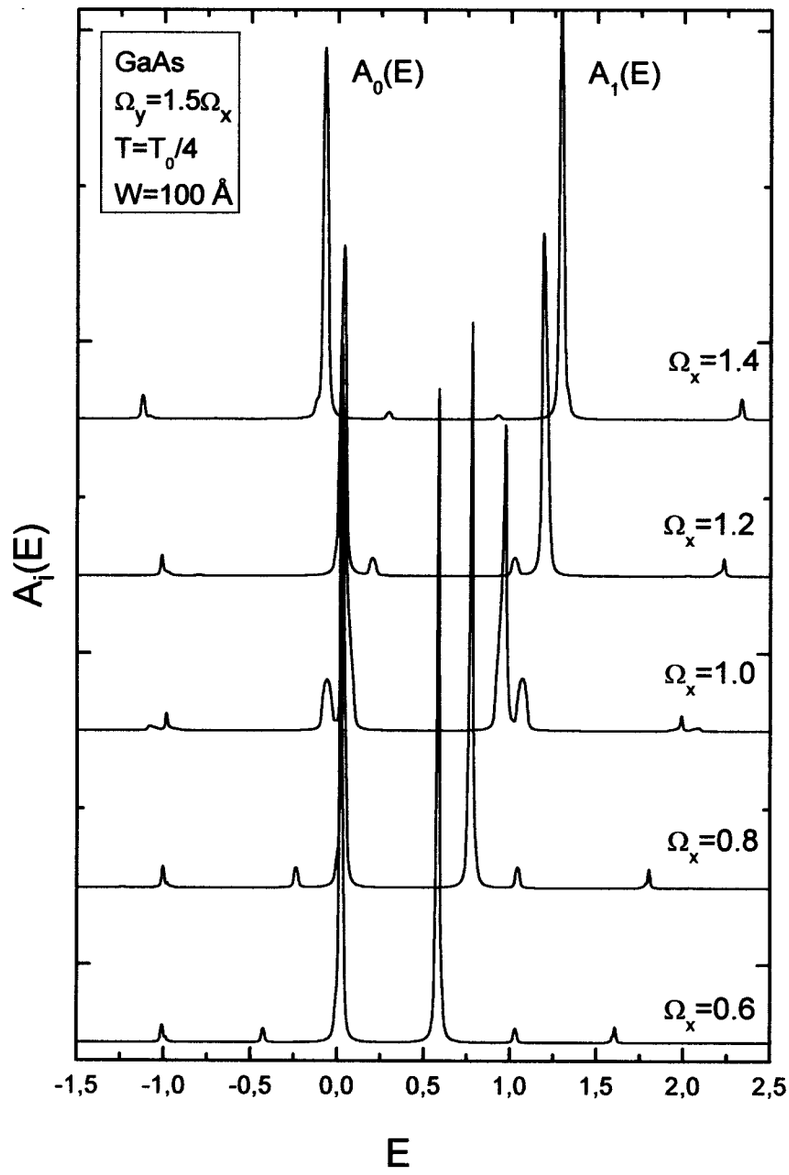


Figura 4.10: Densidade espectral do elétron acoplado com os fônons LO em um ponto quântico simples com largura $W = 100$Å na direção $z$ e um confinamento lateral anisotrópico $\Omega_y = 1.5\Omega_x$. Consideramos cinco valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura é $T = T_0/4$.

## 4.6 Comparações entre os dois métodos

Mostramos os resultados para a densidade espectral utilizando dois modelos diferentes. Um modelo elaborado apartir de um método não perturbativo, que foi o primeiro analisado e, o segundo modelo apresentado foi baseado no formalismo da função de Green. Existem diferenças entre os dois modelos e a princípio é difícil dizer qual dos dois melhor representa o sistema que estamos estudando. Segundo o trabalho de Stauber e seus colaborados [61], o método da função de Green não pode dar resultados corretos visto que o ponto quântico é um sistema que possui níveis discretos de energia enquanto a função de Green é um modelo para um sistema cujas energias são essencialmente contínuas. Vimos na Fig. 4.2 que, um sistema com dois níveis de energia apenas, pode ser extremamente carente em informações para o espectro total de energia, visto que, a presença de mais níveis pode afetar o espectro dos níveis mais baixos quando consideramos interações com fônons. O conjunto de picos que surge na densidade espectral, utilizando o modelo não perturbativo, que compõe a estrutura dos picos do estado fundamental e do primeiro estado excitado, na região fora da ressonância, tem um contorno parecido com a forma dos picos da função de Green, como pode ser observado na Fig. 4.11. A Fig. 4.2, dos níveis de energia, nos fornece uma indicação de como seria a forma da densidade espectral caso considerássemos mais níveis de energia. Não temos certeza sobre o que aconteceria com o nível fundamental e o primeiro nível excitado caso incluíssimos um número maior de níveis. O que podemos afirmar com certeza é que precisariamos de testes mais rigorosos. Necessitaríamos de um cálculo incluindo mais níveis de energia para o modelo não-perturbativo, para afirmar que o método da função de Green é de fato ruim para este sistema. A inclusão de mais níveis no modelo não-perturbativo torna os cálculos teóricos extremamente complicados. No caso da função de Green, o cálculo auto-consistente inclui uma grande ordem de diagramas de Feynmann de interação eletrón-fônon que renormalizam a densidade espectral dos dois níveis considerados.

O modelo não perturbativo exibe uma estrutura de picos que são funções delta de Dirac. Todos os picos, inclusive das estruturas próximas dos picos principais, são funções delta. Enquanto a função de Green, devido aos N diagramas irredutíveis, apresenta uma largura. Por isso a curva da densidade espectral utilizando função de Green é dita contínua. Achamos que a medida que mais fônons são adicionados ao sistema, estados de energia mais altos, como por exemplo, a energia do estado fundamental mais um fônon, mais dois fônons e assim por diante, poderemos ter níveis mais altos se desdobrando em mais níveis de energia. Esta é uma indicação de que se considerarmos este modelo para um sistema com mais níveis eletrônicos, estes níveis poderiam se desdobrar em mais estados de energia quando interagissem com os fônons, formando, para muitos níveis de energia, um espectro praticamente contínuo e o pico da densidade de estado poderia ter uma largura diferente de zero. Assim o modelo não-perturbativo e a função de Green poderiam levar ao mesmo resultado.

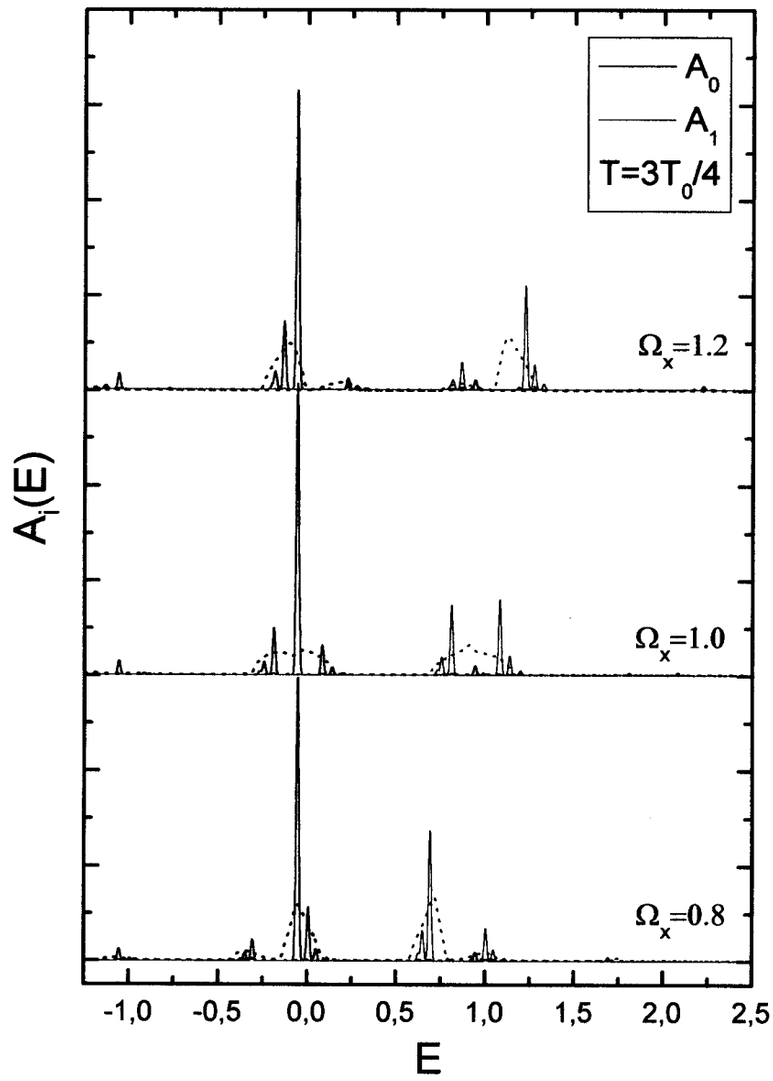


Figura 4.11: Densidade espectral do elétron acoplado com os fônons LO em um ponto quântico simples com largura $W = 100$Å na direção $z$ e um confinamento lateral anisotrópico $\Omega_y = 1.5\Omega_x$. Consideramos cinco valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura é $T = 3T_0/4$.

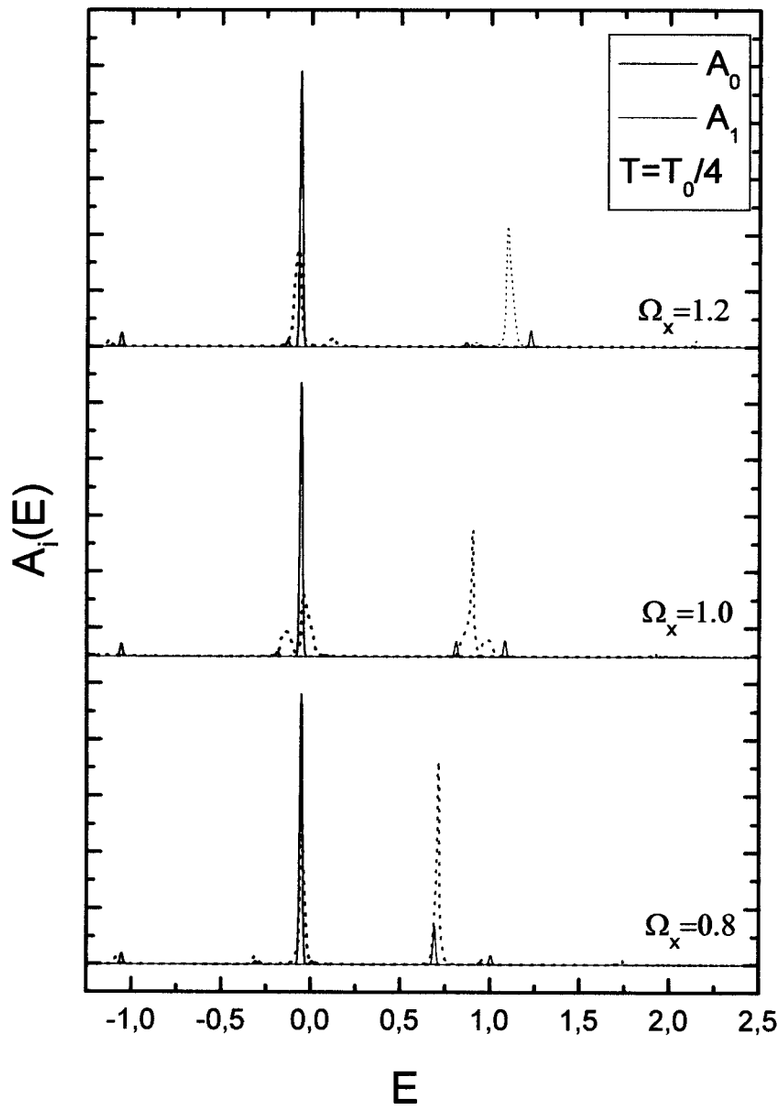


Figura 4.12: Densidade espectral do elétron acoplado com os fônons LO em um ponto quântico simples com largura $W = 100$Å na direção $z$ e um confinamento lateral anisotrópico $\Omega_y = 1.5\Omega_x$. Consideramos cinco valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$. A temperatura é $T = T_0/4$.

## 4.7 Acoplamento forte

Os cálculos ralizados até agora foram feitos para um ponto quântico baseado em GaAs que possui uma constante de acoplamento entre o elétron e os fônons do bulk igual a 0.07. Um resultado interessante que podemos analisar é o espectro de energia e a densidade de estados para outros materiais, com o acoplamento elétron-fônon LO mais intenso, considerado através da constante $\alpha$. No livro de Física de muitos corpos do autor G. Mahan, na seção 4.3 do capítulo 4 intitulada "Independent boson model" é apresentado um resultado para a densidade de estados considerando um nível de energia do elétron acoplado com os fônons LO à temperatura $T = 0$. Fizemos cálculos do espectro de energia do elétron acoplado com os fônons LO no ponto quântico em função da freqüência de confinamento $\Omega_x$ quando a constante de acoplamente $\alpha$ assume valores maiores que 0.07. A Fig. 4.13 (a) e (b) mostra como são os níveis de energia para $\alpha = 0.3$ e 1.0, respectivamente. Podemos observar o desbobramento do primeiro estado excitado através da curva pontilhada na figura. A complexidade da estrutura de níveis de energia aumenta com o aumento da constante de acoplamento. O deslocamento polarônico aumenta para maiores valores de $\alpha$ provocando uma maior separação entre os dois níveis de energia desdobrados.

Fizemos cálculos da densidade de estados para o polaron quando variamos o valor da constante de acoplamento. A Fig. 4.14 mostra a densidade de estados para (a) o estado fundamental e (b) o primeiro estado excitado, para vários valores do confinamento lateral e para uma temperatura muito pequena ($T \sim 4K$), o valor da constante de acoplamento é 0.3. O deslocamento do pico principal é maior e acontece porque a referência de energia $\epsilon_0 - E_p^1$ sofre um deslocamento bem maior visto que $E_p^1$ aumenta com $\alpha$. Na Fig. 4.15 mostramos o mesmo resultado para $\alpha = 1.0$ e na Fig. 4.16 para $\alpha = 3.0$ e com a freqüência de confinamento $\Omega_x = 1.0$, na ressonância. Podemos verificar que os picos aumentam e as réplicas de fônons ficam mais intensas para maiores valores de $\alpha$. Isto ocorre por que a constante de acoplamento da interação

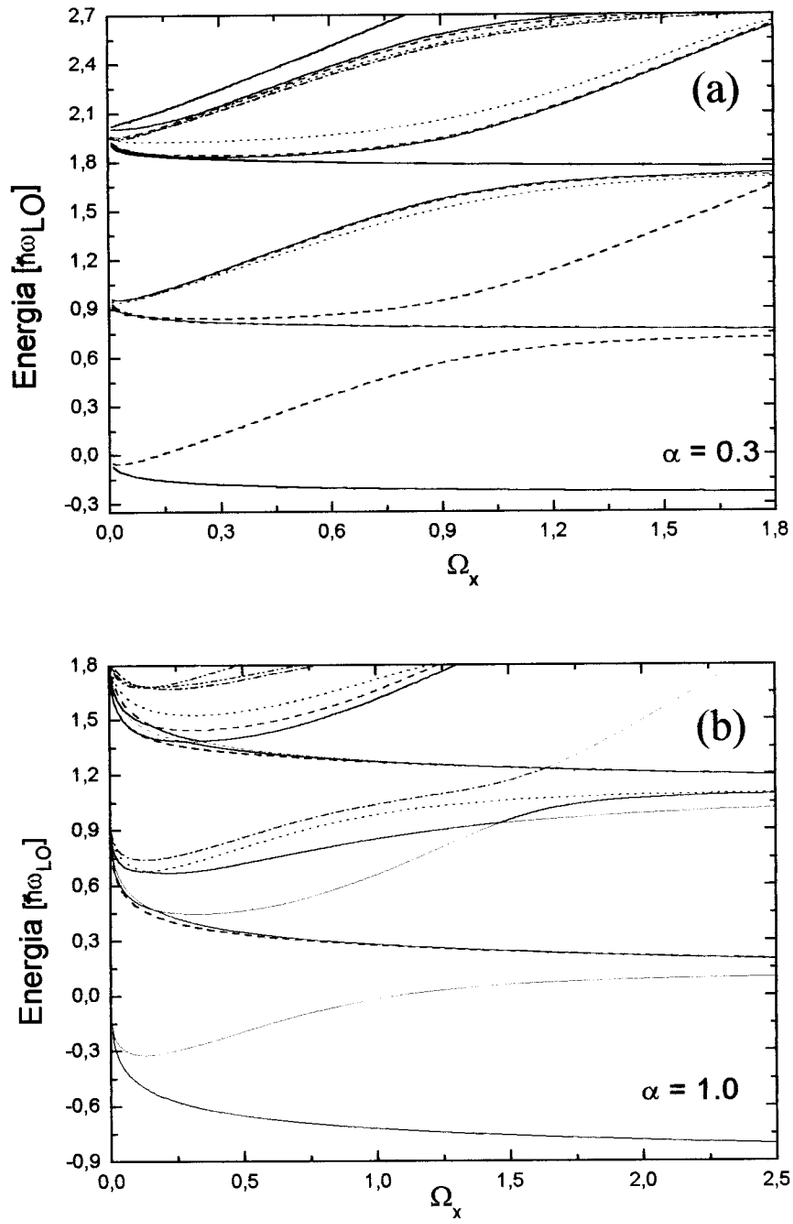


Figura 4.13: Níveis de energia do elétron acoplado com os fônons LO em função do confinamento lateral para um ponto quântico. (a) $\alpha = 0.3$ e (a) $\alpha = 1.0$.

elétron-fônon LO está relacionada com o número de fônons que efetivamente "envolvem" um elétron que se move lentamente no cristal. Para maiores valores de $\alpha$ o acoplamento torna-se mais intenso e as réplicas destes fônons ganham maior importância.

Estes resultados estão bem coerentes com os resultados do Mahan que calcula a densidade de estados a partir do modelo Einstein para bósons. Considerando apenas um nível de energia eletrônico e um elétron acoplado ao conjunto de fônons de mesma energia $\hbar\omega_{LO}$, num regime de temperatura igual a zero, a densidade de estados é determinada. O acoplamento elétron-fônon LO é considerado através da constante de acoplamento $g = \sum_{\vec{q}} \left(M_{\vec{q}}^2/\omega_{\vec{q}}^2\right)$, onde $M_{\vec{q}}$ é o elemento de matriz da interação elétron fônon LO e $\omega_{\vec{q}}$ a freqüência dos fônons. A expressão para a densidade de estados é

$$A(E) = e^{-g} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{g^l}{l!} \delta\left(E - \epsilon_c + \Delta - \hbar\omega_{LO} l\right) \tag{4.44}$$

onde $\Delta = g\hbar\omega_{LO}$. A função espectral é uma série de funções delta de Dirac, separadas pela energia dos fônons LO. $\epsilon_c$ é a energia do estado fundamental e o número quântico $l = 0, 1, ...$ é o número de fônons inseridos no sistema. A Fig. 4.17 mostra a densidade de estados para o estado fundamental para os valores da constante $\alpha$. Podemos verficar que o resultado utilizando o modelo exato está de acordo com o resultado do Mahan obtido com o modelo "independent model boson".

O resultado obtido pelo modelo não-perturbativo inclui dois níveis localizados do elétron acoplado com os fônos. O resultado da densidade de estados para o primeiro nível concorda qualitativamente bem com o resultado da Fig. 4.17. O forma da densidades de estados tem as mesmas características.

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

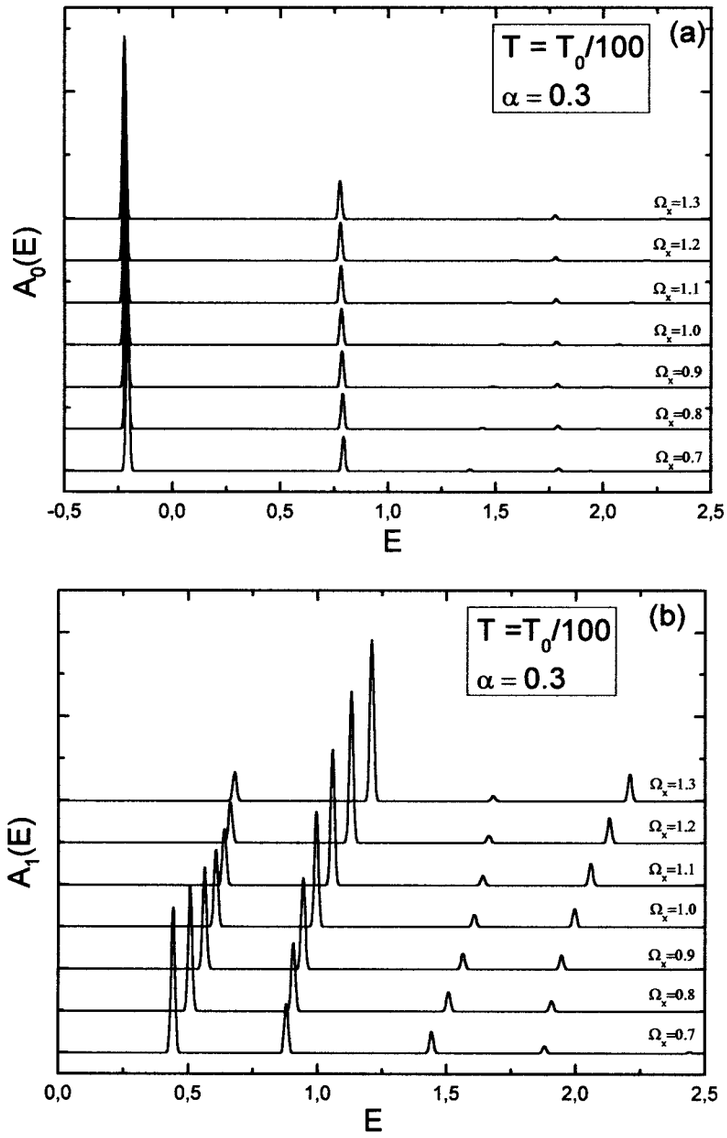


Figura 4.14: Densidade de estados do polaron para temperatura T=$T_0/100$ para $\alpha = 1.0$, considerando vários valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$, para (a) o estado fundamental e (b) o estado primeiro estado excitado.

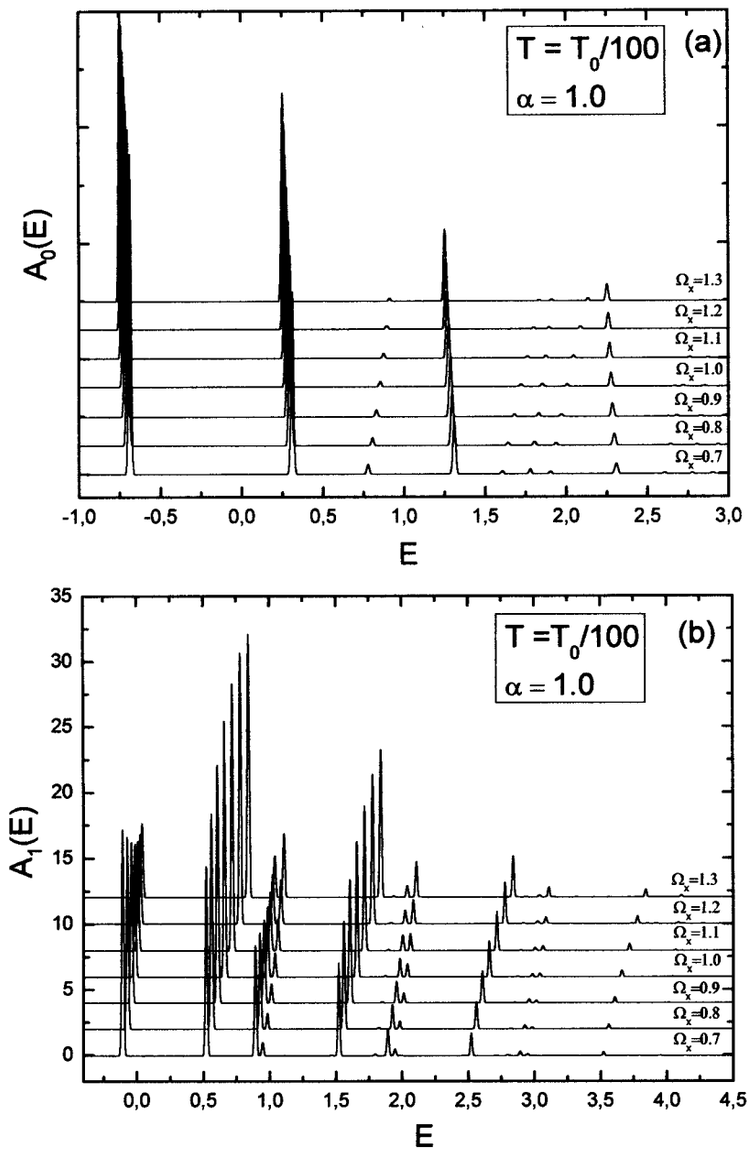


Figura 4.15: Densidade de estados do polaron para temperatura T=$T_0/100$ para $\alpha = 1.0$, considerando vários valores da freqüência de confinamento $\Omega_x$, para (a) o estado fundamental e (b) o estado primeiro estado excitado.

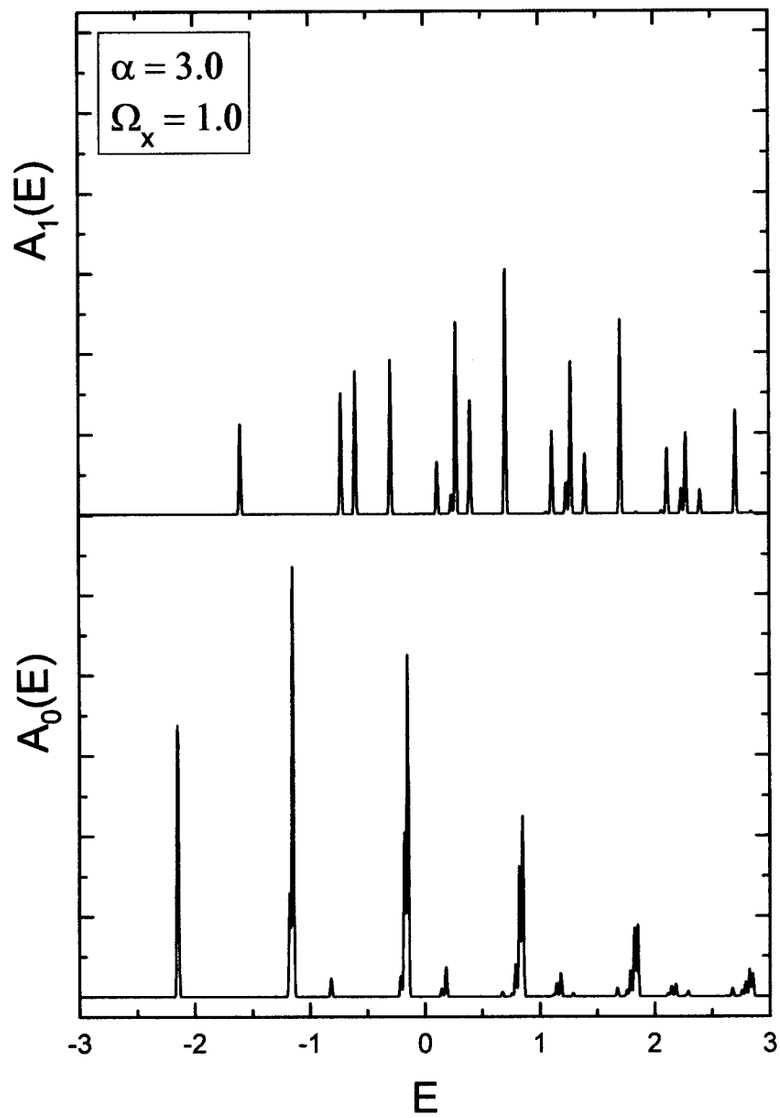


Figura 4.16: Densidade de estados do polaron para temperatura T=$T_0/100$ para $\alpha = 3.0$, considerando $\Omega_x = 1.0$, para (a) o estado fundamental e (b) o estado primeiro estado excitado.

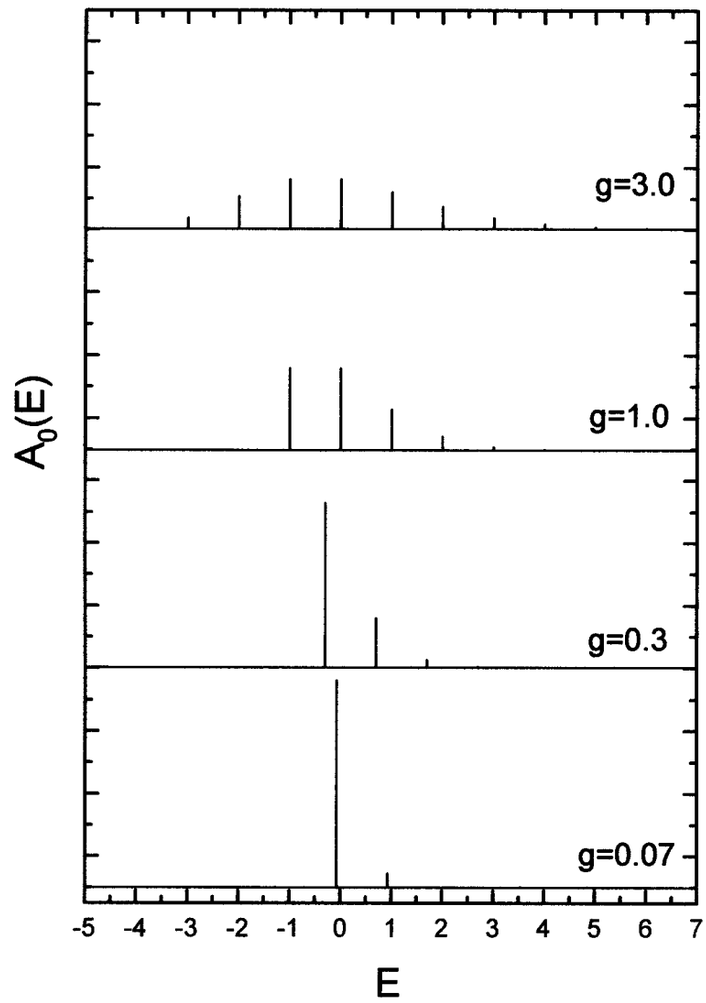


Figura 4.17: Resultado da densidade de estados para um elétron acoplado com os fônon LO em um sistema com apenas um nível e temperatura zero. Consideramos 4 constantes de acoplamento.

## 4.8 Conclusão

Fizemos cálculos para a função espectral através de dois modelos, um modelo não-perutrbativo e o modelo da função de Green em um ponto quântico simples composto de *GaAs-AlGaAs*. Verificamos que o modelo não-perturbativo apresenta uma estrutura de picos determinados por funções delta de Dirac para a função espectral. Tratamos o "potencial químico" como um parâmetro de ajuste. Mostramos, apartir dos nossos cálculos, a densidade de estados do sistema quando $\mu$ é menor que o estado fundamental, e a distribuição do elétron em função da energia quando um elétron está presente no sistema no caso de $\mu = (\epsilon_0 + \epsilon_1)/2$ (densidade espectral).

Compamos o resultado para a função espectral, obtido através da função de Green, para um sistema com dois e com quatro níveis de energia. Observamos que este modelo nos fornece a possibilidade de estudar um sistema mais completo, com mais níveis de energia. Enquanto o modelo exato torna-se muito complicado quando tentamos incluir mais que dois níveis de energia.

Para um regime de acoplamento polarônico forte ($\alpha \geq 1$), nós fizemos cálculos da densidade de estados usando o modelo não-perturbativo considerando dois níveis localizados e observamos que a densidade de estados tem um comportamento semelhante ao resultado obtido pelo modelo "independent model bosons" com apenas um nível localizado [58].

# Capítulo 5

# Conclusões

Nosso trabalho foi apresentado três capítulos que trataram de: Um estudo do espalhamento do elétron por fônons LA e o tempo de relaxação eletrônico em pontos quânticos simples e em dois pontos quânticos acoplados de *GaAs-AlGaAs*; Um estudo dos efeitos do tunelamento quântico assistido por fônons LO em pontos quânticos acoplados compostos de *InAs-AlInAs*; E, um estudo da função espectral do elétron acoplado com os fônons LO em pontos quânticos simples de *GaAs-AlGaAs*.

Num regime de energia onde espalhamento do elétron por fônon LA é dominante, com valores de energia da ordem de $E << \hbar\omega_{LO}$, fizemos cálculos para a taxa de espalhamento do elétron-fônon LA e do tempo de relaxação eletrônico entre dois níveis específicos de energia do elétron confinado no ponto quântico simples. Verificamos que a taxa de espalhamento possui uma forte dependência com a diferença de energia entre dois níveis considerados. O overlap das funções de onda entre dois estados calculado através do elemento de matriz da interação elétron-fonon LA também exerce influência na taxa de espalhamento, sendo que a diferença de energia entre os níveis é o efeito que domina o fenômeno de espalhamento. Para uma energia fixa ($q_0$ fixo), a taxa de espalhamento entre quaisquer dois níveis possui a mesma ordem de grandeza. Verificamos que quando o elétron está em níveis de energia acima do primeiro nível excitado, a relaxação acontece por transições indiretas, relaxando do nível

mais alto para o fundamental passando pelos níveis intermediários, denominado de processo de relaxação por multi-canais. Tal processo domina a relaxação. Num regime de temperatura zero ocorre apenas emissão de fônon com um longo comprimento de onda. Fizemos cálculos da taxa de espalhamento e do tempo de relaxação nos pontos quânticos simples e acoplados considerando os efeitos de um campo magnético externamente aplicado ao sistema. Concluímos que o campo magnético aumenta a taxa de espalhamento e consequentemente torna a relaxação mais rápida. Verificamos através dos nossos resultados que, existe uma intrínseca semelhança entre o espalhamento do elétron por fônons LA em dois pontos quânticos acoplados e em pontos quânticos simples. Verificamos que o efeito do tunelamento aumenta a extensão da função de onda e a largura efetiva do confinamento do elétron na direção $z$ é aumentada. Em função disto ocorrem modificações na taxa de espalhamento. Mostramos que a depressão da taxa de espalhamento nos dois pontos quânticos acoplados e com um campo magnético externo aplicado, que foi apontada em um trabalho recente [55], não existe. Pelo contrário, o campo magnético externo aumenta a taxa de espalhamento em dois pontos quânticos assim como no ponto quântico simples.

Estudamos os efeitos da interação elétron-fônon LO em dois pontos quânticos acoplados compostos de InAs/AlInAs. Tratamos o acoplamento elétron-fônon em dois pontos quânticos acoplados através do formalismo da função de Green e teoria de perturbação degenerada de segunda ordem. Verificamos que o tamanho relativo do ponto quântico aparece como um fator dominante no tunelamento ressonante assistido por fônons. Observamos que a redistribuição da densidade de carga pode ocorrer para certos estados eletrônicos nos pontos quânticos acoplados devido ao tunelamento assistido por fônons, abrindo canais para a hibridização entre os níveis de energia dos pontos quânticos. Para o caso da temperatura finita o estado fundamental é fortemente afetado devido à absorção efetiva de fônon virtual. A hibridização do orbital eletrônico

afeta fortemente a resposta óptica do sistema, levando a uma regra de seleção para a relaxação próximo da ressonância. A resposta óptica em configurações complementares pode ajudar-nos a entender as modificações topológicas nos orbitais que ocorrem através do tunelamento induzido por fônons entre os pontos quânticos.

Calculamos a renormalização da função espectral e a dispersão eletrônica devido ao efeito polarônico num ponto quântico simples. Verificamos através de um modelo não-perturbativo que a função espectral exibe uma estrutura de picos determinados por funções delta de Dirac. Ajustando o "potencial químico" mostramos a densidade de estados do sistema elétron-fônons acoplados e a distribuição do elétron em função da energia quando um elétron um elétron está presente no sistema. A estrutura de picos da densidade de estados concorda com o espectro de energia do polaron para temperatura zero. Para temperaturas altas os dois resultados independem do ajuste do potencial químico.

Considerando inicialmente um ponto quântico simples com uma geometria de um disco quântico cilíndrico nós consideramos dois e quatro níveis de energia e calculamos a densidade espectral. Comparamos os resultados e concluímos que utilizando o modelo da função de Green a renormalização dos dois níveis de energia mais baixos pelos níveis mais altos não sofre grandes modificações qualitativas. Calculamos a densidade espectral para um ponto quântico com confinamento anisotrópico na direção lateral e um poço quântico com largura de 100 Å na direção $z$. Verificamos que ocorre um desdobramento no estado fundamental e no primeiro estado excitado devido a emissão e absorção de fônon. Representações quantitativas e qualitativas da ressonância do polaron foram obtidas para o ponto quântico a diferentes temperaturas. Para entendermos estas quantidades lançamos mão de um processo complexo usando o modelo da função de Green com a auto-energia do elétron calculada auto-consistentemente para renormalizar a densidade espectral.

Estudamos ainda os efeitos polarônicos num regime de acoplamento forte ($\alpha \geq 1$) usando o modelo não-perturbativo. Obtemos a densidade de estados de um sistema com dois níveis localizados e fortemente acoplados com fônons. Verificamos que o resultado para a densidade de estados tem um comportamento parecido com o resultado obtido pelo modelo "independent model bosons" com apenas um nível localizado [58].

# Apêndice

## A.1 Auto-energia do elétron acoplado com os fônons

A função de Green de elétrons pode ser definida da seguinte forma [58]

$$\mathcal{G}\left(\vec{p}, ip_n\right) = \frac{\mathcal{G}^{(0)}\left(\vec{p}, ip_n\right)}{1 - \mathcal{G}^{(0)}\left(\vec{p}, ip_n\right)\Sigma\left(\vec{p}, ip_n\right)} \tag{A.1.1}$$

onde o termo $\sum\left(\vec{p}, ip_n\right)$ é a auto-energia do elétron. A função de Green de fônons pode ser escrita como [58]

$$\mathcal{D}\left(\vec{q}, i\omega_n\right) = \frac{\mathcal{D}^{(0)}\left(\vec{q}, i\omega_n\right)}{1 - \mathcal{D}^{(0)}\left(\vec{q}, i\omega_n\right)\pi\left(\vec{q}, i\omega_n\right)}. \tag{A.1.2}$$

Aqui, o termo $\pi\left(\vec{q}, i\omega_n\right)$ é a polarizabilidade. As funções de Green de elétrons e de fônons de ordem zero são dados por

$$\mathcal{G}^{(0)}\left(\vec{p}, ip_n\right) = \frac{1}{ip_n - \xi_p}$$

e

$$\mathcal{D}^{(0)}\left(\vec{q}, i\omega_n\right) = -\frac{2\omega_q}{\omega_n^2 + \omega_q^2}$$

respectivamente. E assim podemos reescrever as expressões (A.1.1) e (A.1.2) como

$$\mathcal{G}\left(\vec{p}, ip_n\right) = \frac{1}{ip_n - \xi_p - \sum\left(\vec{p}, ip_n\right)}$$

e

$$\mathcal{D}\left(\vec{q}, i\omega_n\right) = -\frac{2\omega_q}{\omega_n^2 + \omega_q^2 + 2\omega_q\pi\left(\vec{q}, i\omega_n\right)}$$

respectivamente.

O que realmente nos interessará é a função de Green retardada, então para isto basta fazermos

$$ip_n \longrightarrow p + i\delta \Longrightarrow \mathcal{G}(\vec{p}, ip_n) \longrightarrow G_{ret}(\vec{p}, p) \tag{A.1.3}$$

$$i\omega_n \longrightarrow \omega + i\delta \Longrightarrow \mathcal{D}(\vec{q}, i\omega_n) \longrightarrow D_{ret}(\vec{q}, \omega). \tag{A.1.4}$$

A auto-energia do elétron devido ao processo de interação com os fônons pode ser escrita da seguinte forma

$$\sum(\vec{p}, ip_n) = \sum_{\vec{q}} M_q^2 S \tag{A.1.5}$$

onde a matriz $S$ é definida como

$$S = -\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n} \mathcal{D}(\vec{q}, i\omega_n)\,\mathcal{G}(\vec{p}+\vec{q}, ip_n + i\omega_n). \tag{A.1.6}$$

Podemos expressar cada função de Green como uma integral sobre a freqüência de sua respectiva função espectral

$$\mathcal{D}(\vec{q}, i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi}\frac{B(\vec{q}, \omega')}{i\omega - \omega'}, \tag{A.1.7}$$

e

$$\mathcal{G}(\vec{p}+\vec{q}, ip_n + i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi}\frac{A(\vec{p}+\vec{q}, \varepsilon')}{ip + i\omega - \varepsilon'}, \tag{A.1.8}$$

onde podemos definir a seguinte relação para a função espectral eletrônica $A(\vec{p}+\vec{q}, \varepsilon')$

$$A(\vec{p}+\vec{q}, \varepsilon') = -2\,\mathrm{Im}\left[G_{ret}(\vec{p}+\vec{q}, \varepsilon')\right]. \tag{A.1.9}$$

Substitundo as expressões (A.1.7) e (A.1.8) em (A.1.6) temos

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} B(\vec{q}, \omega') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi} A(\vec{p}+\vec{q}, \varepsilon')\, S_0(\omega', \varepsilon'), \tag{A.1.10}$$

onde

$$S_0(\omega',\varepsilon') = -\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega}\frac{1}{i\omega-\omega'}\frac{1}{ip+i\omega-\varepsilon'}$$

A soma $S_0(\omega',\varepsilon')$ para o sistema de funções de Green não-interagentes é

$$S_0(\omega',\varepsilon') = \frac{n_B(\omega')+n_F(\varepsilon')}{ip+\omega'-\varepsilon'}, \tag{A.1.11}$$

onde

$$n_B(\omega') = \frac{1}{e^{\beta\omega'}-1} \text{ e } n_F(\varepsilon') = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon'}+1} \tag{A.1.12}$$

são respectivamente a função de distribuição de bósons e a função de distribuição de elétrons.

Substituindo a expressão (A.1.11) em (A.1.10) temos o seguinte resultado

$$S = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}B(\vec{q},\omega')\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon'}{2\pi}A(\vec{p}+\vec{q},\varepsilon')\frac{n_B(\omega')+n_F(\varepsilon')}{ip+\omega'-\varepsilon'}. \tag{A.1.13}$$

Para a função de Green de fônons de ordem zero temos

$$B(\vec{q},\omega') \approx B^{(0)}(\vec{q},\omega')$$

com

$$B^{(0)}(\vec{q},\omega') = 2\pi\left[\delta(\omega-\omega_q)-\delta(\omega+\omega_q)\right]. \tag{A.1.14}$$

Substituindo todas essas expressões na auto-energia, dada por (A.1.5), ficamos com a seguinte expressão

$$\sum(\vec{p},ip) = \sum_{\vec{q}} M_q^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon'}{2\pi}A(\vec{p}+\vec{q},\varepsilon')\left[\frac{n_B(\omega_q)+n_F(\varepsilon')}{ip+\omega_q-\varepsilon'}-\frac{n_B(-\omega_q)+n_F(\varepsilon')}{ip-\omega_q-\varepsilon'}\right]. \tag{A.1.15}$$

Fazendo as seguintes substituições

$$\begin{aligned} n_B(\omega_q) &= \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_q}{k_BT}}-1} = N_q, \\ n_B(-\omega_q) &= -(1+N_q) \end{aligned}$$

na auto-energia, ficamos com

$$\sum(\vec{p}, ip) = \sum_{\vec{q}} M_q^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi} A(\vec{p}+\vec{q}, \varepsilon') \left[ \frac{N_q + n_F(\varepsilon')}{ip + \omega_q - \varepsilon'} + \frac{N_q + 1 - n_F(\varepsilon')}{ip - \omega_q - \varepsilon'} \right].$$

Transformando o somatório em q numa integral e finalmente fazendo $ip \longrightarrow p + i\delta$, que equivale a tomar a função de Green retardada, como foi mostrado em (A.1.3) ficamos com

$$\sum(p) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int\int\int d^3q M_q^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi} A(\vec{p}+\vec{q}, \varepsilon') \left[ \frac{N_q + n_F(\varepsilon')}{p + \omega_q - \varepsilon' + i\delta} + \frac{N_q + 1 - n_F(\varepsilon')}{p - \omega_q - \varepsilon' + i\delta} \right] \tag{A.1.16}$$

que é a expressão geral para a auto-energia do elétron interagindo com os fônons.

## A.2 Modelo não-perturbativo

Apresentamos alguns detalhes da diagonalização do Hamiltoniano (4.3) do capítulo 4. Partindo da equação

$$\begin{aligned} H &= \epsilon_0 c_0^\dagger c_0 + \epsilon_1 c_1^\dagger c_1 + \sum_\lambda \hbar\omega_{LO} B_\xi^\dagger B_\xi + \\ &+ \left(A_2 + A_2^\dagger\right) c_0^\dagger c_0 + \left(A_1 + A_1^\dagger\right)\left(c_0^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_0\right) + \left(A_3 + A_3^\dagger\right) c_1^\dagger c_1, \end{aligned}$$

e utilizando a expressão $A_\xi^{(i,j)} = \sum_{\vec{q}} M_{\vec{q}}^{(i,j)} b_{\vec{q}}$ podemos obter

$$\begin{aligned} A_1 &= \left(\sqrt{\left[\tilde{B}_1, \tilde{B}_1^\dagger\right]}\right) B_1, \; A_1^\dagger = \left(\sqrt{\left[\tilde{B}_1, \tilde{B}_1^\dagger\right]}\right)^* B_1^\dagger, \\ A_2 &= \left(\sqrt{\left[\tilde{B}_2, \tilde{B}_2^\dagger\right]}\right) B_2 + \left[A_2, B_1^\dagger\right] B_1, \; A_2^\dagger = \left(\sqrt{\left[\tilde{B}_2, \tilde{B}_2^\dagger\right]}\right)^* B_2^\dagger + \left(\left[A_2, B_1^\dagger\right]\right)^* B_1^\dagger, \\ A_3 &= \left(\sqrt{\left[\tilde{B}_3, \tilde{B}_3^\dagger\right]}\right) B_3 + \left[A_3, B_1^\dagger\right] B_1 + \left[A_3, B_2^\dagger\right] B_2 \text{ e} \\ A_3^\dagger &= \left(\sqrt{\left[\tilde{B}_3, \tilde{B}_3^\dagger\right]}\right)^* B_3^\dagger + \left(\left[A_3, B_1^\dagger\right]\right)^* B_1^\dagger + \left(\left[A_3, B_2^\dagger\right]\right)^* B_2^\dagger. \end{aligned}$$

O Hamiltoniano como fica

$$\begin{aligned} H = \epsilon_0 c_0^\dagger c_0 + \epsilon_1 c_1^\dagger c_1 + \sum_\lambda \hbar\omega_{LO} B_\lambda^\dagger B_\lambda + \left(C_1 B_1 + C_1^* B_1^\dagger\right)\left(c_1^\dagger c_0 + c_0^\dagger c_1\right) + \\ + \left(C_2 B_1 + C_2^* B_1^\dagger + C_3 B_2 + C_3^* B_2^\dagger\right) c_0^\dagger c_0 + \\ + \left(C_4 B_1 + C_4^* B_1^\dagger + C_5 B_2 + C_5^* B_2^\dagger + C_6 B_3 + C_6^* B_3^\dagger\right) c_1^\dagger c_1. \end{aligned} \tag{A.2.17}$$

As seis constantes acima são $C_1 = \sqrt{\left[\tilde{B}_1, \tilde{B}_1^\dagger\right]}$, $C_2 = \left[A_2, B_1^\dagger\right]$, $C_3 = \sqrt{\left[\tilde{B}_2, \tilde{B}_2^\dagger\right]}$, $C_4 = \left[A_3, B_1^\dagger\right]$, $C_5 = \left[A_3, B_2^\dagger\right]$ e $C_6 = \sqrt{\left[\tilde{B}_3, \tilde{B}_3^\dagger\right]}$. Que resolvidas em termos da intensidade de acoplamento da interação elétron-fônon ficam assim

$$|C_1|^2 = \sum_{\vec{q}} M_{\vec{q}}^{(1,0)} M_{-\vec{q}}^{(0,1)},$$

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

$$C_2 = \frac{\sum_{\vec{q}} M_{\vec{q}}^{(0,0)} M_{-\vec{q}}^{(0,1)}}{C_1},$$

$$|C_3|^2 = \sum_{\vec{q}} M_{\vec{q}}^{(0,0)} M_{-\vec{q}}^{(0,0)} - |C_2|^2,$$

$$C_4 = \frac{\sum_{\vec{q}} M_{\vec{q}}^{(1,1)} M_{-\vec{q}}^{(0,1)}}{C_1} + \frac{C_5 C_2}{C_3},$$

$$C_5 = \frac{\sum_{\vec{q}} M_{\vec{q}}^{(1,1)} M_{-\vec{q}}^{(0,0)}}{C_3},$$

$$\begin{aligned} |C_6|^2 &= \sum_{\vec{q}} M_{\vec{q}}^{(1,1)} M_{-\vec{q}}^{(1,1)} - |C_4|^2 - |C_5|^2 + \\ &+2\,\mathrm{Re}\left[\frac{\left(2C_2^* C_3 C_4 C_5^* - |C_2|^2 |C_5|^2\right)}{C_3^2}\right]. \end{aligned} \tag{A.2.18}$$

Assumindo que a função de onda do elétron no ponto quântico possui uma paridade bem definida, as constante $C_2$ e $C_4$ são iguais a zero e $B_1$ acopla apenas as transições $0 \longrightarrow 1$.

## A.3 Dedução da função espectral

Definindo os auto-estados para o Hamiltoniano diagonal como

$$|\psi_\beta\rangle = \sum_\alpha a_{\beta,\alpha} |\phi_\alpha\rangle, \tag{A.3.19}$$

onde $a_{\beta,\alpha}$ são os coeficientes iguais aos pesos para o auto-estado do Hamiltoniano diagonal. Podemos escrever o traço da expressão (4.25) do capítulo 4 como

$$Tr\left\{\rho\left[c_i(t), c_j^\dagger(0)\right]_+\right\} = \sum_\beta \langle\psi_\beta|\,\rho\left[c_i(t), c_j^\dagger(0)\right]_+ |\psi_\beta\rangle. \tag{A.3.20}$$

Separando o anticomutador em duas partes e inserindo a relação de completeza na expressão, temos

$$Tr\left\{\rho\left[c_i(t),c_j^\dagger(0)\right]_+\right\} = \sum_\beta \rho_\beta \langle\psi_\beta| c_i(t) \sum_{\beta'} |\psi_{\beta'}\rangle \langle\psi_{\beta'}| c_j^\dagger(0) |\psi_\beta\rangle + \\ + \sum_\beta \rho_\beta \langle\psi_\beta| c_j^\dagger(0) \sum_{\beta'} |\psi_{\beta'}\rangle \langle\psi_{\beta'}| c_i(t) |\psi_\beta\rangle, \quad \text{(A.3.21)}$$

onde $\rho_\beta = \langle\psi_\beta| \rho |\psi_\beta\rangle$.

Substituindo $c_i(t) = e^{iHt}c_i(0)e^{-iHt}$ na expressão acima, temos depois de alguns modificações

$$Tr\left\{\rho\left[c_i(t),c_j^\dagger(0)\right]_+\right\} = \sum_{\beta\beta'} \rho_\beta e^{i(\epsilon_\beta-\epsilon_{\beta'})t} \langle\psi_\beta| c_i(0) |\psi_{\beta'}\rangle \langle\psi_{\beta'}| c_j^\dagger(0) |\psi_\beta\rangle + \\ + \sum_\beta \rho_\beta e^{i(\epsilon_{\beta'}-\epsilon_\beta)t} \langle\psi_\beta| c_j^\dagger(0) |\psi_{\beta'}\rangle \langle\psi_{\beta'}| c_i(t) |\psi_\beta\rangle.$$

O estado intermediário $|\psi_{\beta'}\rangle$ deve incluir apenas estados de zero e um elétron. Isto ocorre devido ao fato de no segundo termo o operador de criação precisar criar um estado com 2 elétrons. Isto necessitaria de uma energia muito alta para este sistema. Escrevendo apenas os elementos diagonais do traço, temos

$$Tr\left\{\rho\left[c_i(t),c_i^\dagger(0)\right]_+\right\} = \sum_{\beta,\beta'} (\rho_\beta + \rho_{\beta'})\, e^{i(\epsilon_\beta-\epsilon_{\beta'})t} \left|\langle\psi_\beta| c_i(0) |\psi_{\beta'}\rangle\right|^2, \quad \text{(A.3.22)}$$

onde a contribuição diferente de zero surge apenas quando $i = j$ para os índices dos operadores de criação e destruição de férmions.

Precisamos agora calcular o termo $\langle\psi_\beta| c_i(0) |\psi_{\beta'}\rangle$ que surge na expressão (A.3.21). Utilizando a equação (A.3.18) temos

$$\langle\psi_\beta| c_i(0) |\psi_{\beta'}\rangle = \sum_{\alpha,\alpha'} a^*_{\beta,\alpha} a_{\beta',\alpha'} \langle\phi_\alpha| c_i(0) |\phi_{\alpha'}\rangle. \quad \text{(A.3.23)}$$

Vamos escrever explicitamente as bases $|\phi_\alpha\rangle$ em termos dos modos de fônons cuja base será determinada por $|\mu\rangle$ e dos estados fermiônicos $|M\rangle$, ou seja, $|\phi_\alpha\rangle = |M_e;\mu\rangle$. Substituindo na

expressão (A.3.22) temos

$$\langle\psi_\beta|\, c_i(0)\, |\psi_{\beta'}\rangle = \sum_{\substack{M;\mu \\ M';\mu'}} a^*_{\beta,\ M;\mu}\, a_{\beta',\ M';\mu'}\, \langle M;\mu|\, c_i(0)\, |M';\mu'\rangle\,.$$

Para resolvermos a expressão acima vamos considerar primeiro o estado fundamental, ou seja, faremos $i = 0$ e vamos utilizar simplesmente $c_i(0) = c_0$. Aplicando o operador de destruição nos estados da expressão acima, apenas alguns termos do somatório sobreviverão, de tal forma que a expressão ficará

$$\langle\psi_\beta|\, c_0(0)\, |\psi_{\beta'}\rangle = \sum_{\mu,\mu'} \delta_{\beta=(1,\mu)} a_{\beta',\ (2;\mu')}\, \langle 1;\mu|\, c_0\, |2;\mu'\rangle\,. \tag{A.3.24}$$

Escrevendo a base $|\psi_\beta\rangle = |N;\nu\rangle$, o traço em (A.3.21) fica

$$Tr\left\{\rho\left[c_0(t), c_0^\dagger(0)\right]_+\right\} = \sum_{\beta=(1;\nu)}\ \sum_{\beta'=(2,3;\nu')} \left(\rho_\beta + \rho_{\beta'}\right) e^{i\left(\epsilon_\beta - \epsilon_{\beta'}\right)t} \left|\sum_{\mu'} a_{(2,3;\nu'),\ (2;\mu')}\, \langle 1;\nu|\, c_0\, |2;\mu'\rangle\right|^2 . \tag{A.3.25}$$

Escrevendo explicitamente os estados de fônons como $|\nu\rangle = |n_1, n_2, n_3\rangle$ e $|\mu\rangle = |m_1, m_2, m_3\rangle$, escrevendo os coeficiente $a_{\beta,\alpha} = a_{N;n_1,n_2,n_3,\ N;m_1,m_2,m_3}$ e substituindo os auto-estados referentes aos sub-espaços de zero, um e dois elétrons que aparecem na expressão (A.3.24)

$$\begin{aligned} Tr\left\{\rho\left[c_0(t), c_0^\dagger(0)\right]_+\right\} &= \sum_{1;n_1,n_2,n_3}\ \sum_{2,3;n_1',n_2',n_3'} \left(\rho_{n_1,n_2,n_3} + \rho_{n_1',n_2',n_3'}\right) e^{i\left(\epsilon^1_{n_1,n_2,n_3} - \epsilon^{2,3}_{n_1',n_2',n_3'}\right)t} \times \\ &\times \left|\sum_{\mu'} a_{(2,3;n_1',n_2',n_3'),\ (2;m_1',m_2',m_3')}\, \langle 1;n_1,n_2,n_3|\, c_0\, |2;m_1',m_2',m_3'\rangle\right|^2 . \end{aligned}$$

E temos, depois de alguns detalhes de cálculos, a seguinte expressão para o traço

$$\begin{aligned} Tr\left\{\rho\left[c_0(t), c_0^\dagger(0)\right]_+\right\} &= \sum_{1;n_1,n_2,n_3}\ \sum_{2,3;n_1',n_2',n_3'} \left(\rho_{n_1,n_2,n_3} + \rho_{n_1',n_2',n_3'}\right) e^{i\left(\epsilon^1_{n_1,n_2,n_3} - \epsilon^{2,3}_{n_1',n_2',n_3'}\right)t} \\ &\times \left|\sum_{m_2} a_{(2,3;n_1',n_2'),\ (2;n_1,m_2)}\ {}_0\langle n_2|\, m_2\rangle_{-\eta}\right|^2 \left|\ {}_0\langle n_3|\, n_3'\rangle_{-\kappa}\right|^2 . \end{aligned}$$

Substituindo na função espectral, temos

$$
\begin{aligned}
A_0(E) &= \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Re}\int_0^\infty dt e^{iEt} \times \\
&\left\{ \sum_{1;n_1,n_2,n_3} \sum_{2,3;n_1',n_2',n_3'} \left(\rho_{n_1,n_2,n_3} + \rho_{n_1',n_2',n_3'}\right) e^{i\left(\epsilon^1_{n_1,n_2,n_3} - \epsilon^{2,3}_{n_1',n_2',n_3'}\right)t} \times \right. \\
&\left. \times \left| \sum_{m_2} a_{\substack{(2,3;n_1',n_2'),\\(2;n_1,m_2)}}\, {}_0\langle n_2|\, m_2\rangle_{-\eta} \right|^2 \left|\, {}_0\langle n_3|\, n_3'\rangle_{-\kappa}\right|^2 \right\},
\end{aligned}
$$

que resulta em

$$
\begin{aligned}
A_0(E) &= \sum_{1;n_1,n_2,n_3} \sum_{2,3;n_1',n_2',n_3'} \left(\rho^1_{n_1,n_2,n_3} + \rho^{2,3}_{n_1',n_2',n_3'}\right) \left| \sum_{m_2} a_{\substack{2,3;n_1',n_2',\\2;n_1,m_2}}\, {}_0\langle n_2|\, m_2\rangle_{-\eta} \right|^2 \times \\
&\times \left|{}_0\langle n_3|\, n_3'\rangle_{-\kappa}\right|^2 \delta\left(\epsilon^{2,3}_{n_1',n_2',n_3'} - \epsilon^1_{n_1,n_2,n_3} - E\right).
\end{aligned}
\tag{A.3.26}
$$

Para o primeiro estado excitado, podemos seguir o mesmo procedimento, e o resultado será

$$
\begin{aligned}
A_1(E) &= \sum_{1;n_1,n_2,n_3} \sum_{2,3;n_1',n_2',n_3'} \left(\rho^1_{n_1,n_2,n_3} + \rho^{2,3}_{n_1',n_2',n_3'}\right) \left| \sum_{m_2} a_{\substack{2,3;n_1',n_2',\\3;n_1,m_2}}\, {}_0\langle n_2|\, m_2\rangle_{-\eta+\gamma} \right|^2 \\
&\times \left|{}_0\langle n_3|\, n_3'\rangle_{-\kappa}\right|^2 \delta\left(\epsilon^{2,3}_{n_1',n_2',n_3'} - \epsilon^1_{n_1,n_2,n_3} - E\right).
\end{aligned}
\tag{A.3.27}
$$

# Bibliografia


[1] Dieter Bimberg, Marius Grundmann e Nikolai N. ledentsov, Quantum Dot Heterostructures. Jhon Wiley and Sons Ltd, 1999.

[2] K. Král and Z. Khás, Phys. Rew. B **57**, R2061 (1998).

[3] Augusto Miguel Alcalde Milla, Tese de Doutorado: Relaxação de portadores via interação elétron-fônon em pontos quânticos e poços quânticos, Instituto de Física Gleb Wataghin, Unicamp, 1999.

[4] W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, J. M. Elzerman, T. Fujisawa, S. Tarucha, e L. P. Kouwenhoven, Rev. Mod. Phys. **75**, 1 (2003).

[5] Soma Mukhopadhyay e F. M. Peeters, J. Phys. Condens. Matter **14**, 8005-8010 (2002).

[6] Xin-Qi Li e Yasuhiko Arakawa, Phys. Rew. B **60**, 1915 (1999).

[7] T. D. Harris, D. Gershoni, R. D. Grober, L. Pfeiffer, K. West e N. Chand. Appl. Phys. Lett. 68, 988 (1996).

[8] M. R. S. Tavares, S. Das Sarma, G. Q. Hai, Phys. Rew. B **63,** 045324 (2001 ).

[9] O. Verzelen, R. Ferreira, e G. Bastard, Phys. Rev. B **64**, 075315 (2001).

[10] K. Král, Z. Khás, P. Zdeněk, M. Čerňanský e C. Y. Lin, Physica E **12**, 908-910 (2002).

[11] K. Král, Z. Khás, P. Zdeněk, M. Čerňanský e C. Y. Lin, J. Mod. Phys. **15**, 3503-3512 (2001).

[12] K. Král, P. Zdeněk e Z. Khás, Physica E **20**, 290-294 (2004).

[13] Serguei Vorojtsov, Eduardo R. Mucciolo e Harold U. Baranger, Phys. Rew. B **69,** 115329 (2004).

[14] P. F. Farinas, G. E. Marques e N. Studart, J. Appl. Phys. **79**, 8475 (1996).

[15] A. Mizel e M. L. Cohen, Phys. Rev. B **56,** 6737 (1997).

[16] Y. Z. Hu, S. W. Koch e N. Peyghambarian, J. Lumin. **70,** 185-202 (1996).

[17] P. C. Sercel e K. J. Vahala. Phys. Rew. B **42**, 3690 (1990).

[18] Polarons and Excitons, editado por C. Kuper e G. Whitfield, (Oliver and Boyd, Edinburgh, 1963).

[19] Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors, editado por J. T. Devreese, (North-Holland, Amsterdam, 1972).

[20] Polarons and Excitons in Polar Semiconductors and Ionic Crystals, editado por J. T. Devreese and F. M. Peeters, (Plenum, New York, 1984).

[21] V. López, F. Comas, C. Trallero-Giner, T. Ruf e M. Cardona, Phys. Rev. B **54**, 10502 (1996).

[22] S. S. Oliveira, M. A. R. Souza, A. N. Borges e F. A. P. Osorio, Braz. J. Phys. **29**, 675-678 (1999).

[23] G. Q. HAI, F. M. Peeters, J. T. Devreese, Phys. Rew. B 42, 11063 (1990 ).

[24] Y. J. Wang , H. A. Nickel, B. D. McCombe, F. M. Peeters, J. M. Shi, G. Q. Hai, X. G. Wu, T. J. Eustis e W. Schaff, Phys. Rev. Lett. 79, 3226 (1997 ).

[25] G. Q. Hai, F. M. Peeters e J. T. Devreese, Phys. Rev. B **47**, 10358 (1993).

[26] F. M. Peeters e J. T. Devreese, Phys. Rev. B **25**, 7281 (1982).

[27] F. M. Peeters e J. T. Devreese, Phys. Rev. B **25**, 7302 (1982).

[28] O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, T. Inoshita e H. Sakaki, Phys. Stat. Sol. **190**, 213-219 (2002).

[29] I. Favero, G. Cassabois, R. Ferreira, D. Darson, C. Voisin, J. Tignon, C. Delalande, G. Bastard, Ph. Roussignol e J. M. Gérard, Phys. Rew. B **68**, 233301 (2003).

[30] J. Seebeck, T. R. Nielsen, P. Gartner e F. Jahnke, Phys. Rew. B **71**,125327 (2005).

[31] M. A. Odnoblyudov, I. N. Yassievich e K. A. Chao, Phys. Rew. Lett. **83**, 4884 (1999).

[32] L. Jacak, P. Machnikowski, J. Krasnyj e P. Zoller, Eur. Phys. J. D 22, 319-331 (2003).

[33] S. Sauvage, P. Boucaud, R. P. S. M. Lobo, F. Bras, G. Fishman, R. Prazeres, F. Glotin, J. M. Ortega and J.-M. Gérard, Phys. Rew. Lett. **17**, 177402-1 (2002).

[34] R. Charrour, M. Bouhassoure, M. Fliyou, D. Bria e A. Nougaoui, J. Appl. Phys. **88**, 3514 (2000).

[35] P. A. Knipp, T. L. Reinecke, A. Lorke, M. Fricke e P. M. Petroff, Phys. Rev. B 56, 1516 (1997).

[36] R. Ferreira, O. Verselen e G. Bastard, Semicond. Sci. Technol. 19, S5-S7, (2004).

[37] R. Heitz, I. Mukhametzhanov, O. Stier, A. Madhukar e D. Bimberg, Phys. Rew. Lett. **22**, 4654 (1999).

[38] U. Bockelmann e G. Bastard, Phys. Rev. B **42**, 8947 (1990).

[39] B. K. Ridley, Electrons and phonons in semiconductor multilayers, Cambridge, (Cambridge University Press, 1997).

[40] Fabrice Vallée, Phys. Rev. B **49**, 2460 (1994).

[41] E. Deleporte, S. Hameau, J. N. Isaia, Y. Guldner, O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, J. Zeman e J. M Gérard, Physica E **13**, 155-160 (2002).

[42] M. Bissiri, G. Baldassarri Höger von Högersthal, A.S. Bhatti, M. Capizzi, A Frova, P. Frigeri e S. Franchi, Phys. Rev. B **62**, 4642 (2000).

[43] H. Benisty, C. M. Sotomayor-Torrès e C. Weisbuch, Phys. Rev. B **44**, 10945 (1991).

[44] T. Inoshita e H. Sakaki, Phys. Rev. B **46**, 7260 (1992).

[45] T. Inoshita e H. Sakaki, Physica B **227**, 373-377 (1996).

[46] E. A. Zibik, L. R. Wilson, R. P. Green, G. Bastard, R. Ferreira, P. J. Phillips, D. A. Carder, J-P. R. Wells, J. W. Cockburn, M. S. Skolnick, M. J. Steer e M. Hopkinson, Phys. Rev. B **70**, 161305(R) (2004).

[47] J. Urayama e T. B. Norris, Phys. Rev. Lett. **86**, 4930, (2001).

[48] Xin-Qi Li, Hajime Nakayama e Yasuhiko Arakawa, Phys. Rew. B **59**, 5069 (1999).

[49] O. Verzelen, R. Ferreira, e G. Bastard, Phys. Rev. B **62**, 4809 (2000).

[50] O. Verzelen, G. Bastard e R. Ferreira, Phys. Rev. B **66**, 081308(R) (2002).

[51] O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, S. Hameau, E. Deleporte, Y. Guldner, H. Sakaki e T. Inoshita, Physica B **316-317**, 1-7 (2002).

[52] S. Hameau, Y. Guldner, O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, J. Zeman, A. Lemaître, and J. M. Gerard, Phys. Rev. Lett. **83**, 4152 (1999).

[53] S. Hameau, J. N. Isaia, Y. Guldner, E. Deleporte, O. Verzelen, R. Ferreira and G. Bastard, Phys. Rev. B **65**, 085316 (2002).

[54] C. Kittel, Introdução à Física do Estado Sólido. Rio de Janeiro, (Guanabara dois, 1978).

[55] Andrea Bertoni, Massimo Rontani, Guido Goldoni, Filippo Troiani e Elisa Molinari, Appl. Phys. Lett. **85**, 4729 (2004).

[56] Andrea Bertoni, Massimo Rontani, Guido Goldoni, Filippo Troiani e Elisa Molinari, Physica E **26**, 427-431, (2005).

[57] T. Inoshita e H. Sakaki, Phys. Rev. B **56**, 4355 (1997).

[58] G. Mahan, Many-particle Physics. New York, (Plenum, 1981).

[59] W. Xu e P. Vasilopoulos, Phys. Rev. B **51**, 1694 (1995).

[60] X. C. Xie, Q. P. Li e S. Das Sarma, Phys. Rew. B **42**, 7132 (1990).

[61] T. Stauber, R. Zimmerman, e H. Castella, Phys. Rev. B **62**, 7336 (2000).

[62] M. I. Vasilevskiy, E. V. Anda e S. S. Makler, Phys. Rev. B **70**, 035318-1 (2004).

[63] R. M. Eisberg, R. Resnick, Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas. Rio de Janeiro, (Campus, 1979).

[64] S. Schmitt-Rink, D. A. B. Miller e D. S. Chemla, Phys. Rev. B **35**, 8113 (1987).

[65] N. Mori e T. Ando, Phys. Rev. B **40**, 6175 (1989).

[66] H. Fröhlich, Introduction to the Theory of the Polaron, Scottish Universities' Summer School - 1962; Oliver and Boyd, Edinburgh and London. P. 1.

[67] Alberto Luiz Coimbra, Espaços Vetoriais - Lições e Exemplos, Editora Edgard Blücher LTDA, 1994.

[68] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, Terceira edição, McGraw-Hill International Editions.

[69] G. Lindemann, R. Lassnig, W. Seidenbusch e E. Gornik, Phys. Rev. B **28**, 4693 (1983).

[70] F. M. Peeters e J. T. Devresse, Phys. Rev. B **31**, 3689 (1985).

[71] F. A. P. Osório, M. H. Degani e O. Hipólito, Phys. Rev. B **38**, 8477 (1988).

[72] F. M. Peeters, Xiaoguang Wu e J. T. Devresse, Phys. Rev. B **31**, 3689 (1985).

[73] O. Madelung, Introduction to Solid-State Theory, (Springer-Verlag, Berlin, 1978), p. 175.

[74] E. T. Jaynes e F. W. Cummings, Proc. IEEE **51**, 89 (1963).