UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

O Íon D^- Bidimensional na Presença de um Campo Magnético pelo Método Adiabático Hiperesférico

Antonio Sérgio dos Santos **USP/IFSC/SBI**

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

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Jean-Jacques G. S. De Groote*
CO-ORIENTADOR: *Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Jr.*

SÃO CARLOS

2002

Santos, Antonio Sérgio dos

"O íon D^- bidimensional na presença de um campo magnético pelo método adiabático hiperesférico"/ Antonio Sérgio dos Santos – São Carlos, 2002

Tese (Doutorado) – Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2002 – páginas: 69

Área: Física Básica

Dr. Jean-Jacques Georges Soares De Groote

1. Hiperesférico, 2. Semicondutores, 3. Bidimensional

I. Título

UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO

Instituto de Física de São Carlos

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

**MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE
ANTONIO SERGIO DOS SANTOS, APRESENTADA AO INSTITUTO DE
FÍSICA DE SÃO CARLOS, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 17-06-
2002.**

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Jean -Jacques Georges Soares De Groote (Orientador e Presidente) - UNESP

Prof. Dr. Fernando Jorge da Paixão Filho - UNICAMP

Prof. Dr. Albérico Borges Ferreira da Silva - IQSC-USP

Prof. Dr. Luiz Eugênio Machado - UFSCar

Prof. Dr. Lee Mu Tao - UFSCar

E conhecereis a verdade, e a verdade vos libertará.

Jo. 8:32

*Disse-lhe Jesus: Eu sou o caminho, e a verdade e a vida;
ninguém vem ao Pai, senão por mim.*

Jo. 14:6

*À meus pais Renato e Zoaraide, à minha
avó Joana, à minha esposa Siomara e à
minha filha Maria Júlia.*

Agradecimentos

À DEUS, o SENHOR JESUS, por me sustentar e dar vida.

Gostaria de agradecer às pessoas que direta ou indiretamente me ajudaram na realização desse trabalho:

Ao Prof. Jean-Jacques De Groote pela orientação e amizade, desde os tempos do mestrado.

Ao Prof. Lidério Ioriatti pela idéia do trabalho e pelas discussões físicas do problema.

Aos amigos: Luis Roberto Ramos (pela amizade desde a graduação e pela ajuda nos momentos importantes), José Paulo D'Incão (pelas valiosas discussões a respeito do método hiperesférico e outras mais), Marcelinho, Acácio, Rafael, Serginho (Muniz).

Aos funcionários da biblioteca do IFSC: Ana Mara (pela amizade), Betania, Sibely, Neusa e todos mais.

Ao corpo docente do IFSC que com seu trabalho, e nosso, nos formou.

Aos membros da banca examinadora, pelas observações e sugestões valiosas a respeito do trabalho.

*Este trabalho teve o apoio financeiro do
CNPq e CAPES.*

Sumário

Resumo	1
Abstract	2
1 Introdução	3
1.1 Heteroestruturas Semicondutoras	3
1.2 O Íon D^- em Semicondutores	6
1.3 O Método Adiabático Hiperesférico	9
2 O Método Adiabático Hiperesférico para o Sistema D^- Bidimensional	14
2.1 A Equação de Schrödinger para o Sistema D^- em Duas Dimensões . . .	14
2.2 Equação de Schrödinger nas Coordenadas	
Hiperesféricas	17
2.2.1 A Separação Adiabática	19
3 A Solução da Equação Angular Bidimensional: Curvas de Potencial e Funções de Canal	23
3.1 A Equação Angular para o Sistema D^- em Duas Dimensões	23
3.2 A Solução Angular para $R = 0$	25
3.3 A Solução Angular para $R \rightarrow \infty$	26
3.4 As Condições de Contorno para a Função de Onda Angular	28
3.5 A Expansão em Séries de Potências	29

4	A Equação Radial: Energias de Ligação	34
4.1	A Equação Radial com Campo Magnético	34
4.1.1	A Solução na Origem	36
4.1.2	A Solução Assintótica	37
5	Resultados: Curvas de Potencial e Energias	41
5.1	Análise Numérica	41
5.2	Energias de Ligação	45
5.3	Energias de Ligação no Campo Magnético	50
6	Conclusões e Perspectivas	57
	Referências Bibliográficas	59
	Apêndice I: A Interação Elétron-Elétron	62
	Apêndice II: As Funções de Canal para $R = 0$ em x	65
	Apêndice III: O Íon D^- Quasi-Bidimensional	67

Lista de Figuras

1.1	<i>Poço de potencial em uma heteroestrutura semicondutora.</i>	5
5.1	<i>Curvas de potencial $\mu = 1$ e $\mu = 2$ do sistema D^- para $M = 0$. A curva mais baixa ($\mu = 1$) converge para o limiar de ionização do H ($N=1$) em (2D). Ela comporta somente um estado ligado $E = -4.4816Ry$. A segunda curva ($\mu = 2$) não tem estados ligados.</i>	42
5.2	<i>Curva de potencial ($\mu=1, M=0$) calculada para $J_{max}=10, 12, 14, 16$ e 18. O valor do mínimo da curva aumenta com J_{max}.</i>	43
5.3	<i>Convergência da primeira curva de potencial para $M=0$ em relação à N_c. O mínimo é abaixado conforme N_c aumenta.</i>	44
5.4	<i>Acoplamento não adiabático diagonal $Q_{11}(R)$ para $\mu = 1$. A inclusão desse acoplamento determina o limite superior E_{UAA} para a energia do estado fundamental.</i>	46
5.5	<i>Função de onda radial do estado fundamental. O tamanho do sistema é da ordem de $1 \text{ a.u.} = a_0^* \simeq 103,6 \text{ \AA}$ para o GaAs.</i>	48
5.6	<i>Curvas de potencial mais baixas ($\mu = 1$) para $M = 0$ e $M = 1$. Para momento angular total $M = 0$ há somente um estado ligado enquanto que para $M = 1$ a curva tem um comportamento anti-ligante, não havendo estados ligados.</i>	49
5.7	<i>O efeito do termo de potencial parabólico devido ao campo magnético é adicionado à curva mais baixa ($\mu = 1$) para $M = 0$.</i>	50
5.8	<i>O efeito do termo de potencial parabólico devido ao campo magnético é adicionado à curva mais baixa ($\mu = 1$) para $M = 1$. A curva deixa de ser anti-ligante devido ao campo.</i>	51

5.9	<i>As energias do estado fundamental $M = 0$ e do primeiro estado excitado para $M = 1$ em função do campo magnético.</i>	53
5.10	<i>Energia de ligação do D^- no campo magnético. A curva suave são os valores HAA para o sistema estritamente bidimensional, os pontos são os valores variacionais da referência [12] enquanto que a curva pontilhada são os valores experimentais para largura de poço $L = 100 \text{ \AA}$. Essas energias são as transições ($D^- \rightarrow n = 0$) do estado fundamental $M = 0$ para o primeiro nível de Landau. Para o GaAs, $B = 6.71\gamma$ (T) e $Ry^* = 5.8 \text{ meV}$.</i>	55
5.11	<i>A energia de transição $M = 0 \rightarrow M = 1$ em função do campo magnético. . . .</i>	55

Lista de Tabelas

5.1	<i>Convergência do mínimo da primeira curva de potencial ($M = 0$) em relação ao número de componentes angulares N_c e termos de acoplamento da interação elétron-elétron J_{max}.</i>	43
5.2	<i>Convergência da energia do estado fundamental na aproximação EUAA (Ry), em relação à J_{max} e N_c.</i>	44
5.3	<i>Convergência da energia do estado fundamental para o íon D^-. O resultado variacional da Ref. [8] é usado como comparação.</i>	45
5.4	<i>Convergência da energia (HAA) do estado fundamental $M = 0$, em função do campo magnético, comparada com o resultado variacional da referência [12], em Rydbergs (Ry).</i>	52
5.5	<i>Convergência da energia (HAA) do primeiro estado excitado para $M = 1$, em função do campo magnético, em (Ry). Os resultados são comparados com o resultado variacional da referência [12].</i>	52
5.6	<i>Energia de ligação de um elétron para o D^- em função do campo magnético. Os valores hipersféricos são comparados com os resultados variacionais de Larsen [12] para o sistema 2D e com os valores experimentais da referência [2] para um poço de largura $L = 100 \text{ \AA}$. As energias são dadas em meV.</i>	54
5.7	<i>Comportamento das energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado do D^-, bem como da energia de transição, em função do campo magnético.</i>	56

Resumo

O método adiabático hiperesférico (HAA) é usado para a determinação das energias e funções de onda dos estados ligados de um íon negativamente carregado (D^-), na presença de um campo magnético, em semicondutores. Experimentalmente, a energia de ligação desse sistema é medida com o íon confinado em poços de potencial, ou seja, o sistema é quasi-bidimensional, mas, nesse trabalho é usada a aproximação teórica na qual o sistema é considerado como sendo estritamente bidimensional. Usando uma variável angular hiperesférica modificada, curvas de potencial são obtidas analiticamente, permitindo um cálculo preciso dos níveis de energia deste sistema. O método permite a determinação de um limite superior e um inferior para as energias, cujos valores têm sido obtidos por um procedimento não-adiabático. Os resultados têm precisão comparável aos resultados variacionais encontrados na literatura.

Abstract

The adiabatic hyperspherical approach (HAA) is used to determine the energies and wave functions of the bound states of a negatively charged ion (D^-), in the presence of a magnetic field, in semiconductors. Experimentally, the bound energy of this system is measured with the ion confined in quantum wells, or either, the system is quasi-two dimensional, but, in this work is used the theoretical approach in wich the system is considered as being strictly two dimensional. Using a modified hyperspherical angular variable, potential curves are analitically obtained, allowing an accurate calculation of the energy levels of this system. The method allows to the determination of an upper and lower limit for the energies, whose values have been gotten by a nonadiabatic procedure. The results has comparable accuracy to the variational results found in literature.

Capítulo 1

Introdução

1.1 Heteroestruturas Semicondutoras

Atualmente, camadas alternadas de materiais semicondutores diferentes podem ser crescidas em laboratório pela técnica de MBE ("molecular-beam epitaxy"). Fornos contendo elementos diferentes, como *Al*, *As* e *Ga* evaporam esses elementos para temperaturas diferentes. A abertura e o fechamento desses fornos (o tempo de abertura e fechamento é bem menor que 1s) é controlada e, assim, consegue-se que camadas de semicondutores sejam crescidas sobre um substrato (normalmente um semicondutor) e que as interfaces sejam abruptas. A máquina de MBE é calibrada de forma que a taxa de crescimento dessas camadas seja conhecida (cerca de uma camada monoatômica por segundo), sendo assim possível o controle do número e da largura das camadas. Esses sistemas formam uma estrutura periódica unidimensional chamada superrede ou heteroestrutura.

Uma das heteroestruturas semicondutoras mais amplamente estudadas é a *GaAs*/*Ga_{1-x}Al_xAs*, consistindo de camadas alternadas de *GaAs* e *GaAlAs*, com larguras variando de 20–400 Å. Com a variação da concentração *x* de *Al* no *Ga_{1-x}Al_xAs*, o "gap" entre as bandas de valência e de condução deste semicondutor pode ser feito consideravelmente maior que o do *GaAs*. Isso produz descontinuidades nas bandas de valência e de condução na interface entre os dois semicondutores. Um elétron na banda de condução

do $GaAs$ "verá" uma barreira de potencial na junção e um elétron na banda de condução do $Ga_{1-x}Al_xAs$ "verá" um poço de potencial na junção. Isto leva à formação de barreiras de potencial no $GaAlAs$ e poços quânticos no $GaAs$, onde elétrons e buracos podem ser confinados.

Essas heteroestruturas podem ser dopadas com planos de impurezas, como por exemplo, com Si (tetraivalente). Se o silício substituir um átomo de As (pentavalente), dará origem a um nível aceitador e se substituir um átomo de Ga (trivalente), um elétron ficará ligado ao Si , dando origem a um nível doador. Dopando o semiconductor com uma concentração baixa de impurezas (da ordem de $10^{10}/cm^2$) não há, praticamente, acoplamento entre elas. A posição do plano de impurezas é perfeitamente controlada dentro da heteroestrutura e elas se distribuem aleatoriamente.

Para uma impureza doadora no centro de um poço de potencial no $GaAs/GaAlAs$, a energia de ligação é maior que para um doador no volume ("bulk"). No poço, devido ao confinamento pelo potencial externo, a energia de ligação aumenta. Para uma impureza doadora hidrogenóide, a energia de ligação é $1Ry^*$ no "bulk" e $4Ry^*$ em duas dimensões ($2D$), com o Rydberg efetivo dado por $Ry^* = 13,6m^*/\epsilon^2$, sendo m^* a massa efetiva do elétron na banda de condução e ϵ a constante dielétrica do material semiconductor.

Quando energeticamente favorável, um elétron pode se desligar de uma impureza doadora e ser ligado por uma impureza neutra, formando um íon negativamente carregado, conhecido como o íon D^- .

Para um íon D^- em um poço de potencial, com o eixo z sendo considerado na direção de confinamento, no plano $x - y$ os elétrons são confinados ao núcleo devido, somente, à interação coulombiana. Na direção z , além da interação coulombiana, os elétrons terão a influência do potencial de confinamento $V(z)$, e serão mantidos próximos ao centro

atrativo pelas paredes do poço de potencial. Na ausência do centro atrativo, a função de onda do sistema é separável em (x, y) e z . Ela pode ser expandida na base completa formada pelos autoestados do poço de potencial, $\chi_n(z_i)$. Com a presença do centro atrativo, os vários autoestados do poço são acoplados pelo potencial de Coulomb. Esses acoplamentos são pequenos e, na aproximação quasi-bidimensional, eles são desprezados.

Para valores normalmente usados da concentração x de Al e da largura L do poço, a altura da barreira, V_b , é muito maior que a energia de ligação do sistema (Fig.1.1).

Figura 1.1: Poço de potencial em uma heteroestrutura semicondutora.

Para um poço de largura $L = 100 \text{ \AA}$ no $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, a altura da barreira é da ordem de 300 meV , para $x = 30\%$. A energia de ligação do D^- é da ordem de 3 meV e, assim, o potencial de confinamento pode ser considerado infinito. Neste caso, o espaçamento entre os níveis de energia do poço é bem maior que a energia de ligação do sistema (a separação entre os dois primeiros níveis do poço é da ordem de 200 meV , para largura de poço $L = 100 \text{ \AA}$). Assim, a interação de Coulomb não acopla os outros autoestados do poço e a função de onda total é separável. Quanto menor a largura do poço, melhor torna-se a separação, sendo que no limite bidimensional ($L \rightarrow 0$) a função de onda em z corresponderá ao primeiro autoestado do poço, $\chi_1(z_1, z_2)$, como visto na aproximação quasi-bidimensional, dada no Apêndice III.

1.2 O Íon D^- em Semicondutores

Na primeira metade da década passada, considerável trabalho experimental [1-8] e teórico [9-24] foi feito enfocando os efeitos do confinamento de impurezas doadoras em estruturas quasi-bidimensionais, como poços quânticos de $GaAs/GaAlAs$. Neste sistema, uma impureza doadora hidrogenóide pode ligar dois elétrons indistinguíveis, formando o íon D^- . Tal íon é análogo, em estado sólido, ao íon H^- em física atômica. Este é o sistema de muitos elétrons mais simples onde a correlação elétron-elétron é importante, visto que um elétron blinda a carga positiva da impureza ao outro e assim, a repulsão elétron-elétron torna-se relevante em relação à interação elétron-impureza.

Linhas espectrais referentes à fotoionização do D^- são observadas no espectro de semicondutores ("bulk") [1] e em heteroestruturas semicondutoras, como poços quânticos [2, 3]. Os íons D^- podem ser criados em semicondutores de gap direto por excitação óptica contínua [4]. Diferentemente do "bulk", em heteroestruturas semicondutoras,

tais como em poços quânticos, os íons D^- podem ser criados e podem existir por longos períodos de tempo, mesmo na ausência de excitações ópticas [3]. A identificação experimental do sistema D^- em poços quânticos foi feita por Huan, Najda e Etienne [2] em 1990 através da análise do espectro magnético-ótico de heteroestruturas. Amostras de $GaAs/GaAlAs$ foram dopadas com impurezas (silício) em planos localizados no centro do poço de $GaAs$ e na barreira de $GaAlAs$. Observaram que doadores positivamente ionizados são encontrados na barreira, onde a energia de ligação é menor, enquanto que os íons D^- são encontrados no poço, onde elétrons excedentes, provenientes dos doadores positivamente ionizados, ligam-se aos íons D^0 presentes no poço.

Na ausência de um campo magnético, há somente um estado ligado [5] para o D^- , como no H^- . O confinamento quântico e a presença de um campo magnético na direção de confinamento aumentam drasticamente a energia de ligação do sistema. O campo magnético confina o movimento dos elétrons em um plano perpendicular ao campo. Como em semicondutores as energias de ligação são pequenas, o sistema torna-se mais estável com a presença do campo e, em princípio, é possível a existência de infinitos estados ligados. Além disso, campos magnéticos em semicondutores são equivalentes, por um fator de 10^4 , à campos muito altos no vácuo, tornando possível o estudo de íons negativamente carregados para altos campos magnéticos.

Na literatura existem cálculos teóricos para as energias dos estados ligados do D^- em poços quânticos. Em 1983, Phelps e Bajaj [8] fizeram o primeiro cálculo da energia do estado fundamental do íon D^- em um semicondutor bidimensional (o limite bidimensional pode ser definido como um poço quântico de profundidade infinita e largura $L \rightarrow 0$), sem campo magnético. Usando o método variacional, calcularam uma energia de $-4.48Ry^*$. Sendo assim, a energia de ligação (a energia requerida para remover um dos dois elétrons

do D^- para o infinito) é de $0.48 Ry^*$. Esta energia é cerca de 12% da energia do estado fundamental do hidrogênio em duas dimensões [9], a qual é $-4.0 Ry^*$.

Pang e Louie [10] calcularam a energia do estado fundamental do D^- em poços quânticos, em um campo magnético, usando o método variacional-estatístico de Monte Carlo (DQMC). O valor da energia para alguns valores do campo foi obtida, estando em razoável concordância com os valores experimentais de Huant, Najda e Etienne [2]. Em 1992, Larsen e McCann [11] encontraram que para o íon D^- em duas dimensões, no limite de campo magnético infinito, existem somente quatro estados ligados: o estado fundamental (spin singlete) e o tripleto (spin tripleto). Também em um trabalho de 1992, Larsen e McCann [12], usando o método variacional, calcularam a energia do estado fundamental $M = 0$ e do singlete $M = 1$ do D^- , em duas dimensões, em função do campo magnético. Para o estado fundamental e campo nulo, a energia de ligação $0.478 Ry^*$ é muito próxima do resultado de Phelps e Bajaj [8]. Efeitos de não parabolicidade da banda e correções de polaron foram calculados por Dzyubenko *et al*[13] e Shi *et al*[14]. Energias de transição para o D^- em poços parabólicos, na presença de um campo magnético foram calculadas por Blinowski *et al*[15], com a função variacional formada por uma combinação linear de gaussianas, o que permite a obtenção de resultados analíticos. Recentemente, um resultado analítico para a energia de ligação do D^- em poços quânticos, no limite de campo magnético forte, foi obtido por Monozon [16]. Também recentemente, o método hipersférico foi aplicado ao sistema D^- bidimensional, sem campo magnético, por Ruan *et al* [17, 18] onde foi calculada a energia do estado fundamental e de um estado excitado. Com campo magnético, as energias do estado fundamental e estados excitados foram obtidas, recentemente, por Wang *et al* [19].

Neste trabalho [20], o método adiabático hiperesférico (HAA) é aplicado ao cálculo das energias dos estados ligados do íon D^- em duas dimensões ($2D$), na presença de um campo magnético uniforme. Em contraste com a Ref. [17], na qual a equação hiperesférica foi diagonalizada na base dos harmônicos hiperesféricos, e com a Ref. [18], o sistema de equações hiperesféricas é resolvido com o uso de uma variável angular diferente [30], permitindo a obtenção de funções de onda analíticas.

1.3 O Método Adiabático Hiperesférico

Como no tradicional método adiabático de Born-Oppenheimer, o método adiabático hiperesférico (HAA) é baseado na determinação de curvas de potencial, semelhantes a potenciais moleculares. Essas curvas são potenciais para as equações radiais e delas são determinadas não somente a energia do estado fundamental mas também a de estados excitados.

O método (HAA) foi originalmente elaborado, por Macek [25], para descrever os estados autoionizantes do átomo de hélio. Desde a observação desses estados no espectro de absorção do He , ficou estabelecido que o modelo de partículas independentes é inadequado à sua descrição, pois em um estado ressonante os elétrons estão distantes do núcleo e, assim, a correlação eletrônica passa a ser dominante no sistema. Os estados autoionizantes são estados ressonantes no contínuo mas podem ser calculados, com boa precisão, como estados ligados nas curvas de potencial excitadas. A correlação entre os elétrons acopla esses estados e eles decaem.

Uma das características fundamentais do método é que ele consiste em um procedimento ab-initio. Sendo assim, em princípio o método é analítico e aproximações numéricas são introduzidas em última análise. As funções de onda são precisas e podem ser

utilizadas para a determinação de propriedades do sistema com grande precisão.

Baseado na expansão adiabática da função de onda hipersférica, o método permite a obtenção de um limite superior e um inferior para as energias de estados ligados, convergindo para o valor exato da energia. Inicialmente, a equação de Schrödinger para o sistema de dois elétrons é escrita nas coordenadas hipersféricas, as quais consistem nas coordenadas angulares hipersféricas dos elétrons, denotadas (em 2D) pelo conjunto $\Omega = \{\alpha, \theta_1, \theta_2\}$, e na coordenada radial $R = (r_1 + r_2)^{1/2}$. A equação de Schrödinger é quasi-separável nessas coordenadas, apresentando termos puramente radiais e termos angulares com uma dependência linear em R . Em relação ao movimento dos elétrons em redor do núcleo, descrito pelas variáveis angulares, o hiperradio R varia lentamente e, portanto, pode ser considerado uma variável adiabática. Esse fato sugere uma separação parcial da função de onda hipersférica. Assim, expandindo a função de onda hipersférica em uma base completa (formada pelas funções de canal $\{\Phi_\mu(R; \Omega)\}$), substituindo a expansão na equação de Schrödinger hipersférica e usando a ortonormalidade da base, são obtidos um sistema acoplado de equações diferenciais para R e uma equação de autovalores para a parte angular (operador angular), a qual depende linearmente de R . A equação de autovalores para o operador angular é resolvida, para cada valor de R , pela imposição das condições de contorno resultantes da simetria da função de onda total devida ao princípio de exclusão de Pauli. As autofunções são as funções de canal $\Phi_\mu(R; \Omega)$ e os autovalores são funções de R , as chamadas curvas de potencial $U_\mu(R)$. Posteriormente, o sistema de equações radiais acopladas para as curvas de potencial e acoplamentos não-adiabáticos é resolvido, sendo assim obtidas as energias dos estados ligados e funções de onda radiais.

O método hipersférico trata o sistema de forma coletiva, sem referência a funções de

onda das partículas individuais. Uma vez que a função de onda hiperesférica está associada ao conjunto dos elétrons, a correlação está incluída nessas funções. A correlação está contida no operador angular e assim as curvas de potencial e funções de canal contêm os aspectos físicos fundamentais do sistema.

Diferentemente da solução direta, uma das formas utilizadas para a solução da equação angular hiperesférica é a diagonalização na base dos harmônicos hiperesféricos, que são as soluções dessa equação para $R = 0$. Esta solução é inadequada, pois a convergência é muito lenta, requerendo um grande esforço computacional. Isto é esperado, pois os harmônicos hiperesféricos não são adequados à descrição do sistema para R grande, onde domina o comportamento do sistema ionizado.

O método (HAA) tem sido aplicado a sistemas atômicos de três corpos onde a correlação é importante, tais como o átomo de hélio (estados ligados e ressonantes [24-35], fotoionização [37]), o íon H^- (estado fundamental [27, 28] e estados ressonantes [29], espalhamento [27, 28]) e também a sistemas como excitons ligados a impurezas doadoras em semicondutores, onde as massas efetivas do elétron e do buraco variam, dependendo do material semicondutor [31, 38, 39].

A introdução do método hiperesférico (HAA) ao estudo de sistemas bidimensionais tem sido motivada pelos bons resultados obtidos para sistemas tridimensionais fortemente correlacionados [25, 39]. Neste trabalho, o método adiabático hiperesférico (HAA) é aplicado ao cálculo preciso das energias dos estados ligados do íon D^- em duas dimensões ($2D$), na presença de um campo magnético uniforme e estático, perpendicular ao plano no qual os elétrons estão confinados. Em contraste com a Ref. [17], na qual a equação hiperesférica foi diagonalizada na base dos harmônicos hiperesféricos, e com a Ref. [18], o sistema de equações hiperesféricas é resolvido com o uso de uma variável

angular diferente [30]. A introdução desta variável permite a solução analítica das equações angulares acopladas pela aplicação do método de Fröbenius. Funções de onda angulares são obtidas como séries de potências rapidamente convergentes. Como resultado, são obtidas curvas de potencial precisas, o que é uma pré-condição para a determinação precisa das energias e funções de onda radiais. Além disso, para se obter resultados mais precisos, os acoplamentos não-adiabáticos são introduzidos na solução do sistema de equações radiais. As energias do estado fundamental $M = 0$ e do primeiro estado excitado para $M = 1$, bem como a energia de transição, são obtidas em função da intensidade do campo magnético. Os resultados tem precisão comparável aos melhores resultados variacionais encontrados na literatura [8, 12]. Os resultados obtidos para o sistema D^- bidimensional mostram que o método (HAA) também é preciso para sistemas (2D), com uma precisão equivalente à obtida para sistemas semelhantes em três dimensões. Além disso, como as funções de onda são exatas, propriedades do sistema, como as forças de oscilador, podem ser calculadas de forma adequada.

Este trabalho está estruturado da seguinte forma: no Capítulo 2 a equação de Schrödinger para o íon D^- em duas dimensões, na presença de um campo magnético, é escrita nas coordenadas hipersféricas. A separação adiabática é estabelecida, resultando em uma equação de autovalores para a parte angular e em um conjunto de equações diferenciais radiais acopladas para as curvas de potencial. As várias aproximações para as energias dos estados ligados são estabelecidas, conforme o teorema das desigualdades básicas [40, 41].

No Capítulo 3 a equação de autovalores para o operador angular é resolvida analiticamente, tanto para $R = 0$ e $R \rightarrow \infty$, onde as funções de onda angulares e os valores das curvas de potencial são bem estabelecidos, bem como para todo valor de R , onde uma expansão em séries de potências é usada. As condições de contorno para a função de onda

total, devido ao princípio de exclusão de Pauli, são estabelecidas. As curvas de potencial são numericamente obtidas pela aplicação dessas condições de contorno para a relação de recorrência da série.

No Capítulo 4, as energias e as funções radiais são obtidas pela resolução do conjunto de equações diferenciais radiais acopladas. Esse sistema de equações é resolvido numericamente, utilizando os acoplamentos não adiabáticos e as curvas de potencial calculadas previamente. A função radial $F_\mu(R)$ é obtida analiticamente nos limites $R \rightarrow 0$ e $R \rightarrow \infty$ para campo nulo, bem como a solução assintótica com campo magnético. Essas expressões analíticas são usadas como condições iniciais para a propagação numérica das soluções até um valor de R_{match} , onde condições de continuidade são impostas para a função radial e sua derivada, obtendo assim as energias dos estados ligados e as funções de onda radiais.

No Capítulo 5 são mostrados os resultados dos cálculos da energia do estado fundamental do íon D^- em duas dimensões, sem campo magnético e das energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado na presença de um campo magnético. Para se ter um controle do efeito dos truncamentos sobre os valores numéricos, inicialmente é feita uma análise numérica da convergência dos resultados em função das várias expansões que são usadas ao longo do procedimento adiabático hiperesférico. Também são mostradas as curvas de potencial, com o potencial parabólico devido ao campo magnético adicionado, para momento angular total $M = 0$ e $M = 1$, bem como a energia de transição entre esses estados em função do campo magnético. Também, a energia de ligação de um elétron é comparada com o resultado experimental para o sistema confinado em um poço de potencial de largura L , dando uma estimativa da variação da energia de ligação do sistema bidimensional em relação ao quasi-bidimensional.

Capítulo 2

O Método Adiabático Hiperesférico para o Sistema D^- Bidimensional

2.1 A Equação de Schrödinger para o Sistema D^- em Duas Dimensões

Em um semicondutor, na aproximação da massa efetiva, com a impureza sendo considerada o centro de massa do sistema, o Hamiltoniano para o sistema atômico de três corpos constituído por dois elétrons de carga $-e$, ligados pelo potencial coulombiano de uma impureza doadora de carga $+Ze$ e na presença de um campo magnético uniforme $\vec{B}$ orientado na direção do eixo $\hat{z}$ é:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{\epsilon r_1} - \frac{Ze^2}{\epsilon r_2} + \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \\ & + \frac{eB}{m^*c} (\hat{L}_{z1} + \hat{L}_{z2}) + \frac{e^2 B^2}{4m^*c^2} (r_1^2 + r_2^2) \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$ são os vetores posição dos elétrons em relação à impureza, $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ a distância entre os dois elétrons, m^* a massa efetiva do elétron e Z o número atômico da impureza. O potencial coulombiano é blindado pela constante dielétrica estática ϵ do meio semicondutor. O campo magnético tem intensidade B , c é a velocidade da luz e $\hat{L}_{zi}$, com $i = 1, 2$, é o operador momento angular do i -ésimo elétron, o qual está orientado na direção do eixo $\hat{z}$.

No Hamiltoniano $\hat{H}$, além das energias cinética e de interação coulombiana dos elétrons, há um termo linear de interação com o campo magnético, o qual é proporcional ao momento angular total $\hat{L}_z = \hat{L}_{z1} + \hat{L}_{z2}$ e um termo quadrático com o campo, o qual depende somente das coordenadas radiais dos elétrons.

O fato de um elétron em um semiconductor experimentar um potencial periódico, diferentemente do vácuo, está incluso no uso de uma massa efetiva m^* , ao invés da massa do elétron livre, m . A massa efetiva do elétron é considerada como sendo isotrópica.

A parte do Hamiltoniano devida à interação do spin total eletrônico com o campo magnético, $g_e^* \frac{eB}{2mc} \hat{S}_z$, é exatamente separável na equação de Schödinger, visto que o operador de spin total $\hat{S}_z$ comuta com o restante do Hamiltoniano, $\hat{H}$. Seus autovalores são E_s e assim, a energia total é dada por $E_T = E + E_s$. Neste trabalho são considerados somente estados de spin singleto, isto é, funções de onda de spin antissimétricas, correspondendo a $S_z = 0$.

Para o íon D^- , o qual tem numero atômico $Z = 1$, com os elétrons confinados a moverem-se em duas dimensões, no plano perpendicular ao campo magnético uniforme, a equação de Schrödinger $\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, independente do tempo e não-relativística é:

$$\left[-\nabla_1^2 - \nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \gamma \hat{L}_z + \frac{\gamma^2}{4} (r_1^2 + r_2^2) - 2E \right] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0, \quad (2.2)$$

onde γ é um parâmetro adimensional que envolve o campo, como definido adiante.

Para tornar adimensionais as unidades de comprimento e energia, as distâncias são medidas em unidades de $a_0^* = \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* e^2}$, o raio de Bohr efetivo, e as energias são medidas em unidades de $Ry^* = \frac{e^2}{2\epsilon a_0^*} = \frac{m^*}{\epsilon^2} (13,6) \text{ eV}$, o Rydberg efetivo. As unidades atômicas

(a.u.) são usadas, onde $\hbar = e = m^* = \varepsilon = 1$, com a massa efetiva m^* dada em termos da massa do elétron livre m .

Devido à simetria cilíndrica do sistema, o Laplaciano é escrito em coordenadas polares, sendo dado como:

$$\nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + \frac{1}{r_i} \frac{\partial}{\partial r_i} - \frac{\hat{L}_{z_i}^2}{r_i^2}, \quad (2.3)$$

com o operador momento angular azimutal dado por $\hat{L}_{z_i}^2 = -\frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2}$, $i = 1, 2$.

Considerando a intensidade do campo magnético externo, três regimes podem ser definidos para o sistema de dois elétrons no campo: primeiramente, para campo magnético fraco, os termos que envolvem o campo (γ) são bem menores que a interação de Coulomb total ($H_{Coul} \gg H_{mag}$). Assim, a interação com o campo magnético pode ser tratada como uma perturbação, dando origem ao conhecido efeito Zeeman. No limite de altos campos magnéticos, os termos de campo são bem maiores que a interação coulombiana ($H_{Coul} \ll H_{mag}$). Nesse limite os elétrons são livres e movem-se no campo magnético uniforme com energias discretas dadas pelos níveis de Landau. Entre esses dois limites, há o intervalo para valores de campo em que a interação de Coulomb é da mesma ordem que a interação com o campo magnético ($H_{Coul} \simeq H_{mag}$). Para comparação dessas interações, um parâmetro adimensional que envolve o campo é definido:

$$\gamma = \frac{\hbar \omega_c}{2Ry^*}$$

o qual é a razão da energia do campo magnético pelo Rydberg efetivo e $\omega_c = \frac{eB}{m^*c}$ é a frequência ciclotrônica. Assim, para $\gamma \simeq 1$ as interações terão a mesma intensidade.

Nota-se dessa definição que γ também é a energia do primeiro nível de Landau para um elétron, em unidades de Ry^* .

Nesse trabalho, as energias do sistema são calculadas em um intervalo de campo dado por $0.0 \leq \gamma \leq 4.0$.

2.2 Equação de Schrödinger nas Coordenadas Hiperesféricas

No método hiperesférico, ao invés das coordenadas esféricas $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$ dos elétrons, as distâncias relativas dos elétrons ao núcleo são dadas em termos das coordenadas hiperesféricas R e α :

$$r_1 = R \operatorname{sen} \alpha \quad (2.4)$$

$$r_2 = R \operatorname{cos} \alpha \quad (2.5)$$

Com a inversão das relações anteriores, as coordenadas hiperesféricas são definidas como:

$$R = r_1^2 + r_2^2 \quad (2.6)$$

$$\alpha = \arctan \left(\frac{r_1}{r_2} \right), \quad (2.7)$$

onde R é o raio hiperesférico, definido no intervalo:

$$0 \leq R \leq \infty ,$$

e α é o ângulo hiperesférico, definido no intervalo:

$$0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2} .$$

O uso de coordenadas hiperesféricas na resolução da equação de Schrödinger para sistemas de três corpos é adequado. Nessas coordenadas, a equação de Schrödinger é aproximadamente separável em uma parte radial, a qual envolve somente uma coordenada radial R , e em uma parte angular $\Omega = \{\alpha, \theta_1, \theta_2\}$, a qual depende da coordenada radial parametricamente. Além disso, as coordenadas hiperesféricas são coordenadas coletivas, sendo adequadas ao tratamento da correlação elétron-elétron.

Nas coordenadas hipersféricas a equação de Schrödinger (Eq.2.2) fica:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{3}{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\hat{U}(R; \Omega)}{R^2} - \frac{\gamma^2}{4} R^2 + 2E_B \right] \Psi(R, \Omega) = 0, \quad (2.8)$$

onde o operador angular $\hat{U}(R; \Omega)$ é definido como:

$$\begin{aligned} \hat{U}(R; \Omega) = & \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + (\cot \alpha - \tan \alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha} - \frac{\hat{L}_{z_1}^2}{\sin^2 \alpha} - \frac{\hat{L}_{z_2}^2}{\cos^2 \alpha} + \frac{2R}{\sin \alpha} + \frac{2R}{\cos \alpha} - \\ & - \frac{2R}{\sqrt{1 - \sin 2\alpha \cos(\theta_1 - \theta_2)}} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Desde que o operador de momento angular total comuta com o hamiltoniano, a contribuição para a energia do termo linear em γ é exatamente separável na equação (Eq.2.2) e o operador de momento angular total $\hat{L}_z$ pode ser previamente diagonalizado. Assim, a energia foi redefinida como:

$$E_B = E - \frac{\gamma M}{2}, \quad |M| = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.10)$$

onde $M = m_1 + m_2$ é o momento angular azimutal total dos elétrons, em unidades de $\hbar$.

O termo quadrático em γ é um potencial de oscilador harmônico. Ele não tem dependência angular, assim somente contribui para a parte radial da equação hipersférica. Esta é uma das vantagens da aplicação de coordenadas hipersféricas ao problema de três corpos na presença de um campo magnético, visto que a dependência com o campo na equação hipersférica (Eq.2.8) é, naturalmente, somente na coordenada radial R .

A normalização da função de onda total hipersférica é dada por:

$$\int |\Psi(R, \Omega)|^2 R^3 \sin \alpha \cos \alpha dR d\Omega = 1. \quad (2.11)$$

Através da seguinte renormalização,

$$\Psi(R, \Omega) = \frac{R^{-3/2}}{(\sin \alpha \cos \alpha)^{1/2}} \psi(R, \Omega), \quad (2.12)$$

ela é escrita na forma canônica:

$$\int |\psi(R, \Omega)|^2 dR d\Omega = 1. \quad (2.13)$$

Com a renormalização da função de onda total, as derivadas primeiras na equação hipersférica (Eq.2.8) e na equação angular (Eq.2.9) são eliminadas. A equação hipersférica (Eq.2.8) fica:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{\hat{U}_{RN}(R; \Omega) + 1/4}{R^2} - \frac{\gamma^2}{4} R^2 + 2E_B \right] \psi(R, \Omega) = 0, \quad (2.14)$$

e o operador angular renormalizado é:

$$\begin{aligned} \hat{U}_{RN}(R; \Omega) = & \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \frac{(\hat{L}_{z_1}^2 - 1/4)}{\text{sen} \alpha^2} - \frac{(\hat{L}_{z_2}^2 - 1/4)}{\text{cos} \alpha^2} + \frac{2R}{\text{sen} \alpha} + \frac{2R}{\text{cos} \alpha} - \\ & - \frac{2R}{\sqrt{1 - \text{sen} 2\alpha \text{cos}(\theta_1 - \theta_2)}} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Toda a dependência angular da equação hipersférica (Eq.2.14) está contida no operador $\hat{U}_{RN}$ (Eq.2.15). Os três primeiros termos representam uma barreira centrífuga, enquanto que toda a interação coulombiana do sistema está contida nos termos que dependem linearmente de R .

2.2.1 A Separação Adiabática

A mudança de coordenadas polares para coordenadas hipersféricas torna a equação de Schrödinger (Eq.2.14) aproximadamente separável em uma parte radial R e em uma parte angular $\Omega = \{\alpha, \theta_1, \theta_2\}$. Nessas coordenadas, a equação não é completamente separável porque o termo $\hat{U}_{RN}$ depende de R e Ω simultaneamente.

A separação adiabática assume que a função de onda total $\psi(R, \Omega)$ pode ser expandida na base formada pelas autofunções do operador angular $\hat{U}_{RN}$ (Eq.2.15), onde R em $\hat{U}_{RN}(R; \Omega)$ e $\Phi_\mu(R; \Omega)$ é considerado como um parâmetro [25].

A solução da equação de autovalores para o operador angular $\hat{U}_{RN}$ fornece um conjunto de autofunções e autovalores:

$$\hat{U}_{RN}\Phi_\mu(R;\Omega) = U_\mu(R)\Phi_\mu(R;\Omega), \quad (2.16)$$

onde o índice de canal, $\mu = \{m_1, m_2, \lambda\}$, denota um conjunto de números quânticos resultantes da solução do sistema de equações angulares (Eq.2.16) para $R = 0$. Nesta equação, a dependência em R é considerada parametricamente; para cada valor de R obtém-se um valor de $U_\mu(R)$. Os autovalores $U_\mu(R)$ são, portanto, funções de R e formam as chamadas curvas de potencial.

O operador angular é hermitiano e suas autofunções $\Phi_\mu(R;\Omega)$ formam uma base ortonormal e completa. Nesta base, a relação de ortonormalidade é dada por:

$$\int \Phi_\mu^*(R;\Omega) \Phi_\nu(R;\Omega) d\Omega = \delta_{\mu\nu}. \quad (2.17)$$

A separação adiabática consiste na expansão da função de onda total na base das funções de canal, dada por:

$$\psi(R, \Omega) = \sum_\mu F_\mu(R) \Phi_\mu(R; \Omega). \quad (2.18)$$

Esta aproximação é semelhante à de Born-Oppenheimer para moléculas diatômicas, onde R é a distância internuclear, a qual varia adiabaticamente, pois a massa dos núcleos é muito maior que a massa do elétron. Para sistemas atômicos, esta aproximação presumivelmente é válida pois R^2 é o momento de inércia total do sistema, o qual varia lentamente em relação ao movimento angular das partículas.

Numericamente, a expansão adiabática é rapidamente convergente, sendo as funções de canal, portanto, uma base eficiente.

Substituindo a expansão (Eq.2.18) na equação hipersférica (Eq.2.14), usando a equação de autovalores (Eq.2.16) e a relação de ortonormalidade (Eq.2.17) para as funções de

canal, obtem-se um sistema de equações diferenciais radiais acopladas, cujas soluções são as funções radiais $F_\mu(R)$:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{U_\mu(R) + 1/4}{R^2} - \frac{\gamma^2 R^2}{4} + 2E_B \right] F_\mu(R) + \sum_\nu \left[2P_{\mu\nu}(R) \frac{d}{dR} + Q_{\mu\nu}(R) \right] F_\nu(R) = 0, \quad (2.19)$$

onde os termos de acoplamento das equações radiais, $P_{\mu\nu}(R)$ e $Q_{\mu\nu}(R)$, são dados pelas integrais angulares:

$$P_{\mu\nu}(R) = \int \Phi_\mu^*(R; \Omega) \frac{\partial}{\partial R} \Phi_\nu(R; \Omega) d\Omega \quad (2.20)$$

e:

$$Q_{\mu\nu}(R) = \int \Phi_\mu^*(R; \Omega) \frac{\partial^2}{\partial R^2} \Phi_\nu(R; \Omega) d\Omega. \quad (2.21)$$

A energia total E_B é obtida pela resolução desse sistema infinito de equações radiais acopladas (Eq.2.19). Truncando o conjunto infinito de equações, obtêm-se soluções aproximadas, o que reduz o sistema infinito a um conjunto finito de equações acopladas.

Em uma primeira aproximação, todos os acoplamentos radiais $P_{\mu\nu}(R)$ e $Q_{\mu\nu}(R)$ podem ser desprezados e a equação radial resultante é resolvida para uma curva de potencial $U_\mu(R)$. Esta é a chamada aproximação adiabática extrema (EAA) e a energia calculada desta forma (E_{EUA}) é um limite inferior para a energia exata. Com a inclusão dos acoplamentos diagonais $Q_{\mu\mu}(R)$ obtem-se um limite superior (E_{UA}) para a energia exata. Esta é a aproximação adiabática desacoplada (UAA). Finalmente, com a inclusão sistemática dos termos de acoplamentos não diagonais, $P_{\mu\nu}(R)$ e $Q_{\mu\nu}(R)$, a energia calculada (E_{CAA}) aproxima-se do valor exato da energia até a precisão desejada ser atingida. Esta é a aproximação adiabática acoplada (CAA).

A seguinte desigualdade é válida para a energia de algum estado do sistema de três corpos, na aproximação adiabática:

$$E_{EUAA} \leq E_{exata} \leq E_{CAA} \leq E_{UAA} \quad (2.22)$$

Este resultado é estabelecido por um teorema, conforme demonstrado na literatura [40, 41]. Ele restringe o intervalo ao qual a energia exata pertence, sendo útil para a análise quantitativa dos resultados numéricos.

Capítulo 3

A Solução da Equação Angular Bidimensional: Curvas de Potencial e Funções de Canal

3.1 A Equação Angular para o Sistema D^- em Duas Dimensões

O Método Adiabático Hipersférico consiste na separabilidade aproximada da equação de Schrödinger nas coordenadas hipersféricas. Nessas coordenadas, a equação de Schrödinger separa-se em uma parte puramente radial, a qual depende unicamente do raio hipersférico R , e em uma parte que depende do conjunto das variáveis angulares $\Omega = \{\alpha, \theta_1, \theta_2\}$, mas com uma dependência paramétrica em R . Assim, na resolução da equação hipersférica (Eq. 2.14) expande-se a função de onda total na base formada pelas funções de canal $\Phi_\mu(R; \Omega)$, conforme (Eq. 2.18), ou seja, na base formada pelas soluções da equação de autovalores para o operador angular (Eq. 2.15):

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \frac{(\hat{L}_{z_1}^2 - 1/4)}{\sin^2 \alpha} - \frac{(\hat{L}_{z_2}^2 - 1/4)}{\cos^2 \alpha} + \frac{2R}{\sin \alpha} + \frac{2R}{\cos \alpha} - \frac{2R}{\sqrt{1 - \sin 2\alpha \cos(\theta_1 - \theta_2)}} \right] \Phi_\mu(R; \Omega) = U_\mu(R) \Phi_\mu(R; \Omega). \quad (3.1)$$

O operador angular contém todas as interações coulombianas, além da energia cinética relacionada ao movimento angular e, portanto, caracteriza a natureza do sistema.

Conforme R varia em (Eq.3.1), os autovalores $U_\mu(R)$ formam funções contínuas de R , as chamadas curvas de potencial. As soluções da equação angular determinam as soluções do sistema de equações diferenciais radiais acopladas (Eq.2.19) através das curvas de potencial e funções de canal. As autofunções normalizadas $\Phi_\mu(R; \Omega)$ são utilizadas na determinação dos acoplamentos não-adiabáticos do sistema de equações radiais.

Inicialmente, a função de onda angular hipersférica é expandida em uma base a qual diagonaliza, simultaneamente, os operadores de momento angular $\hat{L}_{z_i}^2$ dos elétrons:

$$\Phi_\mu(R; \Omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m_1, m_2} G_{M, m_1, m_2}^\mu(R; \alpha) \exp(im_1\theta_1 + im_2\theta_2), \quad (3.2)$$

onde m_1 e m_2 são os números quânticos magnéticos dos elétrons, os quais podem assumir os valores $m_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, e$:

$$M = m_1 + m_2$$

é o número quântico magnético total.

Substituindo a expansão (Eq.3.2) na equação de autovalores (Eq.3.1) e utilizando a ortogonalidade da base,

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_1 d\theta_2 \exp(im_1\theta_1 + im_2\theta_2) \exp(-im'_1\theta_1 - im'_2\theta_2) = \\ = \delta_{m_1, m_2} \delta_{m'_1, m'_2}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

obtem-se o sistema de equações diferenciais acopladas:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \frac{(m_1^2 - 1/4)}{\sin \alpha^2} - \frac{(m_2^2 - 1/4)}{\cos \alpha^2} + \frac{2R}{\sin \alpha} + \frac{2R}{\cos \alpha} - U_\mu(R) \right] G_{M, m_1, m_2}^\mu(R; \alpha) = \\ = 2R \sum_{m'_1, m'_2} K_{m_1, m_2, m'_1, m'_2}(\alpha) G_{M, m'_1, m'_2}^\mu(R; \alpha), \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde os acoplamentos das equações são dados por:

$$\begin{aligned} K_{m_1, m_2, m'_1, m'_2}(\alpha) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_1 d\theta_2 \frac{\exp(im'_1 - im_1)\theta_1 \exp(im'_2 - im_2)\theta_2}{\sqrt{1 - \sin 2\alpha \cos(\theta_1 - \theta_2)}} = \\ &= \frac{1}{\cos \alpha} \sum_{J=0}^{\infty} (\tan \alpha)^J \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta [\cos(\Delta m \theta) - i \sin(\Delta m \theta)] P_J(\cos \theta), \end{aligned} \quad (3.5)$$

com $\theta = (\theta_1 - \theta_2)$ e $\Delta m = m'_1 - m_1$.

A integral dupla nos acoplamentos, (Eq.3.5), é resolvida pela expansão da raiz quadrada nos polinômios de Legendre, $P_J(\cos \theta)$. A solução é dada no Apêndice I.

O sistema de equações diferenciais (Eq.3.4) é infinitamente acoplado pelo termo de interação $e - e$. Numericamente, este sistema é truncado para um número finito de equações acopladas pela selecção de um valor máximo m_{max} para m_1 e m_2 na expansão de $\Phi_\mu(R; \Omega)$, conforme a equação (Eq.3.2).

O sistema de equações diferenciais (Eq.3.4) tem soluções analíticas para $R = 0$ e $R \rightarrow \infty$. Para $R \rightarrow 0$ as interações coulombianas são desprezíveis e as soluções são os Hipersféricos Harmônicos. Já $R \rightarrow \infty$ representa um dos elétrons afastado do núcleo, o que corresponde a soluções hidrogenóides para a função de onda angular $G_{M, m_1, m_2}^\mu(R; \alpha)$.

3.2 A Solução Angular para $R = 0$

Para $R = 0$ o sistema de equações diferenciais (Eq.3.4) torna-se:

$$\left[\frac{d^2}{d\alpha^2} - \frac{(m_1^2 - 1/4)}{\sin^2 \alpha} - \frac{(m_2^2 - 1/4)}{\cos^2 \alpha} - U_\mu(0) \right] G_{M, m_1, m_2}^\mu(0; \alpha) = 0. \quad (3.6)$$

Com a mudança de variável $\alpha = \frac{\alpha'}{2}$ na equação (Eq.3.6), obtem-se a forma canônica da equação de Jacobi:

$$\left[\frac{d^2}{d\alpha'^2} + \frac{(1 - 4m_1^2)}{16\sin^2(\alpha'/2)} + \frac{(1 - 4m_2^2)}{16\cos^2(\alpha'/2)} - \frac{U_\mu(0)}{4} \right] Q_\lambda^{m_1, m_2}(0; \alpha') = 0, \quad (3.7)$$

cujas soluções são dadas em termo dos polinômios de Jacobi de grau λ :

$$Q_{\lambda}^{m_1, m_2}(0; \alpha') = [\text{sen}(\alpha'/2)]^{m_1+1/2} [\cos(\alpha'/2)]^{m_2+1/2} P_{\lambda}^{m_1, m_2}(\cos \alpha'), \quad (3.8)$$

onde $\lambda = 0, 1, 2, \dots$.

Sendo assim, os valores das curvas de potencial para $R = 0$ são dados por:

$$U_{\mu}(0) = -(m_1 + m_2 + 2\lambda + 1)^2, \quad (3.9)$$

e as soluções da equação (Eq.3.6) para $R = 0$ são dadas por:

$$G_{M, m_1, m_2}^{\mu}(0; \alpha) = (\text{sen} \alpha)^{|m_1|+1/2} (\cos \alpha)^{|m_2|+1/2} P_{\lambda}^{|m_1|, |m_2|}(\cos 2\alpha). \quad (3.10)$$

As funções (Eq.3.10) são os harmônicos hipersféricos e cada conjunto de números quânticos $\mu = \{m_1, m_2, \lambda\}$ define uma solução da equação angular.

3.3 A Solução Angular para $R \rightarrow \infty$

Para grandes valores de R , um dos elétrons está afastado do núcleo e o sistema resultante é hidrogenóide. Desta forma, $\alpha = \arctan\left(\frac{r_1}{r_2}\right)$ é pequeno e as funções trigonométricas na equação angular (Eq.3.4) podem ser expandidas em séries:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{d^2}{d\alpha^2} - (m_1^2 - 1/4) \left(\frac{1}{\alpha^2} + \frac{1}{3} + \dots \right) - (m_2^2 - 1/4) (1 + \alpha^2 + \dots) + \right. \\ & \quad \left. + 2ZR \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{\alpha}{6} + 1 + \frac{\alpha^2}{2} + \dots \right) - U_{\mu}(R) \right] G_{M, m_1, m_2}^{\mu}(R; \alpha) = \\ & \quad = 2R \sum_{(m'_1=m_1), m'_2} (1 + \frac{\alpha^2}{2} + \dots) G_{M, m'_1, m'_2}^{\mu}(R; \alpha) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Fazendo a transformação de coordenadas $\rho = R\alpha$ e tomando termos até de ordem $O[R^2]$, obtem-se a equação:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{(m_1^2 - 1/4)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} - W \right] G_{M, m_1, m_2}^{\mu}(R; \alpha) = 0, \quad (3.12)$$

onde W é dado por:

$$W = \frac{U_\mu(R)}{R^2} - \frac{2(Z-1)}{R} + \frac{(m_1^2 - 1/4)}{3R^2} + \frac{(m_2^2 - 1/4)}{R^2}. \quad (3.13)$$

Fazendo a mudança de variável $\tilde{x} = 2\sqrt{W}\rho$ na equação (Eq.3.12), obtem-se a equação angular (Eq.3.11) na forma da equação associada de Laguerre:

$$\left[\frac{d^2}{d\tilde{x}^2} - \frac{(m_1^2 - 1/4)}{\tilde{x}^2} + \frac{Z}{\sqrt{W}} \frac{1}{\tilde{x}} - \frac{1}{4} \right] G_{M,m_1,m_2}^\mu(\tilde{x}) = 0, \quad (3.14)$$

cujas soluções são:

$$G_{M,m_1,m_2}^\mu(\tilde{x}) = \exp(-\tilde{x}/2) \tilde{x}^{(2m_1+1)/2} L_N^{2m_1}(\tilde{x}), \quad (3.15)$$

onde $L_N^{2m_1}(\tilde{x})$ formam um conjunto de polinômios ortogonais, os polinômios associados de Laguerre, de grau $N = 0, 1, 2, 3, \dots$ e índice $2m_1$.

Assim, as soluções angulares para $R \rightarrow \infty$ satisfazem a condição de contorno:

$$\lim_{\tilde{x} \rightarrow \infty} G_{M,m_1,m_2}^\mu(\tilde{x}) = 0.$$

As curvas de potencial para $R \rightarrow \infty$ são dadas por:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{U_\mu(R)}{R^2} = \frac{4Z^2}{N_\mu^2} + \frac{2(Z-1)}{R} + \frac{[(-m_1^2/3) - m_2^2 + 1/3]}{R^2}, \quad (3.16)$$

onde $N_\mu = 2N + 2m_1 + 1$, assumindo os valores $N_\mu = 1, 3, 5, \dots$.

Para $Z = 1$ o segundo termo à direita na equação (Eq.3.16) é nulo. As curvas de potencial convergem para os limites assintóticos que correspondem aos níveis de energia do átomo de hidrogênio em duas dimensões, mais uma correção que depende do número quântico magnético. Assim, o primeiro limiar de ionização do sistema corresponde ao valor -4 (a.u.) e os estados ligados devem ter energias menores que esse valor.

3.4 As Condições de Contorno para a Função de Onda Angular

A simetria da função de onda total é imposta pelo princípio de exclusão de Pauli. Sendo assim, as condições de contorno para as funções de canal hiperesféricas $\Phi_\mu(R; \Omega)$ podem ser determinadas. Permutando as coordenadas dos elétrons obtém-se:

$$(R, \alpha, \theta_1, \theta_2) \rightarrow \left(R, \frac{\pi}{2} - \alpha, \theta_2, \theta_1\right) .$$

A parte de spin na função de onda total é indexada pelo número quântico de spin total S , onde $S = 0$ indica o singlete de spin, o qual é anti-simétrico e $S = 1$ indica o tripleto de spin, o qual é simétrico. Como a função de onda total deve ser antissimétrica, a parte espacial deve, então, obedecer à relação:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (-1)^S \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

Nas coordenadas hiperesféricas, a relação anterior para a função de onda é dada por:

$$\sum_{\mu} F_{\mu}(R) \Phi_{\mu}(R; \alpha, \theta_1, \theta_2) = (-1)^S \sum_{\mu} F_{\mu}(R) \Phi_{\mu}\left(R; \frac{\pi}{2} - \alpha, \theta_2, \theta_1\right) \quad (3.17)$$

Desde que R é invariante sob a permutação das coordenadas dos elétrons, a função radial fica invariante e a simetrização recai sobre as funções de canal:

$$\Phi_{\mu}(R; \alpha, \theta_1, \theta_2) = (-1)^S \Phi_{\mu}\left(R; \frac{\pi}{2} - \alpha, \theta_2, \theta_1\right) .$$

Substituindo a expansão de $\Phi_{\mu}(R; \alpha, \theta_1, \theta_2)$, (Eq.3.2), obtém-se:

$$\sum_{m_1, m_2} [G_{M, m_1, m_2}^{\mu}(R; \alpha) - (-1)^S G_{M, m_2, m_1}^{\mu}(R; \frac{\pi}{2} - \alpha)] \exp(im_1 \theta_1 + im_2 \theta_2) = 0 ,$$

que resulta na equação:

$$G_{M, m_1, m_2}^{\mu}(R; \alpha) = (-1)^S G_{M, m_2, m_1}^{\mu}(R; \frac{\pi}{2} - \alpha)$$

Esta equação deve ser obedecida para todo valor de α . As condições de contorno para a função de onda angular e sua derivada para $\alpha_0 = \frac{\pi}{4}$ no intervalo simétrico $(0, \pi/2)$ são:

$$G_{M,m_1,m_2}^\mu(R; \pi/4) = (-1)^S G_{M,m_2,m_1}^\mu(R; \pi/4) \quad (3.18)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial \alpha} G_{M,m_1,m_2}^\mu(R; \alpha) \right]_{\pi/4} = (-1)^{S+1} \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} G_{M,m_2,m_1}^\mu(R; \alpha) \right]_{\pi/4}. \quad (3.19)$$

O procedimento numérico para a resolução do sistema de equações (Eq.3.4), juntamente com as condições de contorno (Eq.3.18) e (Eq.3.19), consiste na expansão da solução em séries de potências. Utilizando uma variável adequada, $x = \tan(\alpha/2)$, a série resultante é válida para todo valor de R .

3.5 A Expansão em Séries de Potências

O sistema de equações angulares (Eq.3.4) possui pólos em $\alpha = (0, \pi/2)$. As soluções fisicamente aceitáveis desse sistema de equações requerem que as funções $G_{M,m_1,m_2}^\mu(R; \alpha)$ e suas derivadas sejam contínuas em todo o domínio $0 \leq \alpha \leq \pi/2$. Assim, com a separação dos comportamentos para $R = 0$ e para a região assintótica $R \rightarrow \infty$ na função de onda angular, as soluções da equação (Eq.3.4) ficam:

$$G_{M,m_1,m_2}^\mu(R; \alpha) = (\sin \alpha)^{|m_1|+1/2} (\cos \alpha)^{|m_2|+1/2} \exp(P\alpha) H_{M,m_1,m_2}^\mu(R; \alpha), \quad (3.20)$$

as quais são contínuas para $\alpha = (0, \pi/2)$.

Na equação (Eq.3.20),

$$P = -\frac{2R}{N_\mu},$$

com $N_\mu = (2N + 2m_1 + 1) = 1, 3, 5, \dots$ correspondendo ao número quântico principal do átomo de hidrogênio em duas dimensões. A função exponencial incrementa a convergência da função de onda angular para R grande.

Substituindo a solução (Eq.3.20) na equação (Eq.3.4), obtem-se a equação:

$$\left\{ \frac{d^2}{d\alpha^2} + 2[(|m_1| + 1/2)\cot\alpha - (|m_2| + 1/2)\tan\alpha + P] \frac{d}{d\alpha} + \frac{2R}{\sin\alpha} + \frac{2R}{\cos\alpha} + \right. \\ \left. + 2P[(|m_1| + 1/2)\cot\alpha - (|m_2| + 1/2)\tan\alpha] + P^2 - (|m_1| + |m_2| + 1)^2 - \right. \\ \left. - U_\mu(R) \right\} H_{M,m_1}^\mu(R; \alpha) - \frac{2R}{\cos\alpha} \sum_{J, m'_1} (\tan\alpha)^J (\sin\alpha)^{|m'_1| - |m_1|} (\cos\alpha)^{|m'_2| - |m_2|} \times \\ \times C^\mu(M, m_1, m'_1, J) H_{M,m'_1}^\mu(R; \alpha) = 0, \quad (3.21)$$

Na equação (Eq.3.21) o índice m_2 pode ser removido do índice de soma visto que ele é relacionado a m_1 pela equação $m_2 = M - m_1$.

As constantes de acoplamento $C^\mu(M, m_1, m'_1, J)$ são dadas no Apêndice I.

A equação (Eq.3.21) é de tratamento numérico difícil, devido a seus coeficientes serem funções de $\sin\alpha$ e $\cos\alpha$, que são funções divergentes para $\alpha = 0$ e $\alpha = \pi/2$. Sendo assim, a equação (Eq.3.21) é resolvida analiticamente em uma nova variável,

$$x = \tan(\alpha/2),$$

tal que os coeficientes da equação tornam-se funções racionais de x . Assim, as soluções podem ser obtidas por meio de uma expansão da função de onda em séries de Frobenius. Essas séries são rapidamente convergentes.

Nesta nova variável, a solução não é polinomial para $R = 0$. Isto pode ser corrigido com uma última modificação na função de onda angular (Eq.3.20):

$$H_{M,m_1}^\mu(R; x) = (1 + x^2)^{-s} \tilde{H}_{M,m'_1}^\mu(R; x), \quad (3.22)$$

onde $s = |m_1| + |m_2| + 1 - \sqrt{U_\mu(0)}$, conforme dado no Apêndice II.

Nesta variável, a equação (Eq.3.21) torna-se:

$$\left[A(x) \frac{d^2}{dx^2} + B(x, m_1, m_2) \frac{d}{dx} + C(x, m_1, m_2) \right] \tilde{H}_{M, m_1}^\mu(R; x) - \sum_{J, m'_1} D(x, M, m_1, m'_1, J) \tilde{H}_{M, m'_1}^\mu(R; x) = 0, \quad (3.23)$$

onde os coeficientes são dados por:

$$A(x) = -x^7 - x^5 + x^3 + x,$$

$$B(x, m_1, m_2) = (2|m_1| - 4s - 1)x^6 - 4Px^5 - (2|m_1| + 8m_2 + 5)x^4 - (2|m_1| + 8|m_2| - 4s + 3)x^2 + 4Px + 2|m_1| + 1,$$

$$C(x, m_1, m_2) = 4(s|m_1| - s^2)x^5 + 4(P|m_1| + P/2 - 2Ps - ZR)x^4 - 4[P^2 - s^2 + 2s|m_1| + 4s|m_2| + 3s - 2ZR - (|m_1| + |m_2| + 1)^2 - U_\mu(R)]x^3 - 4P(2|m_1| + 4|m_2| - 2s + 3)x^2 + 4[P^2 + s|m_1| + s + 2ZR - (|m_1| + |m_2| + 1)^2 - U_\mu(R)]x + 4P|m_1| + 2P + 4ZR,$$

$$D(x, M, m_1, m'_1, J) = R 2^{|m'_1| - |m_1| + J + 3} x^{|m'_1| - |m_1| + J + 1} (1 + x^2)^{s' - s + 1} \times \times (1 - x^2)^{|M - m'_1| - |M - m_1| - J} C^\mu(M, m_1, m'_1, J).$$

As equações (Eq.3.23) tem pólos em $x = 0, \pm 1e \pm i$. Como $0 \leq \alpha \leq \pi/2$, o domínio de x é $0 \leq x \leq 1$.

Devido à simetria do Hamiltoniano, é suficiente a resolução do sistema (Eq.3.23) no intervalo $0 \leq x < x_0$. Para o intervalo $x_0 < x \leq 1$, x é substituído por $y = \frac{1-x}{1+x}$ e, usando

as condições de contorno impostas pelo princípio de exclusão de Pauli, determina-se a solução para todo o domínio $0 \leq x \leq 1$:

$$\tilde{H}_{M,m_1,m_2}^\mu(R; x) = (-1)^S \tilde{H}_{M,m_2,m_1}^\mu(R; y)$$

Os coeficientes da (Eq.3.23) podem ser escritos em uma forma mais compacta como:

$$A(x) = \sum_{i=0}^{Na} Q_2(i) x^i \quad (3.24)$$

$$B(x, m_1, m_2) = \sum_{i=0}^{Nb} Q_1(i, m_1, m_2) x^i \quad (3.25)$$

$$C(x, m_1, m_2) = \sum_{i=0}^{Nc} Q_0(i, m_1, m_2) x^i \quad (3.26)$$

O termo de acoplamento $D(x, M, m_1, m'_1, J)$ pode também ser escrito em potências da variável x expandindo-se o termo $(1 - x^2)$ como:

$$(1 - x^2)^{|m'_2| - |m_2| - J} = \sum_{k=0}^{k \max} q(k, m_2, m'_2, J) x^{2k}, \quad (3.27)$$

onde, se,

$$(|m'_2| - |m_2| - J) \geq 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} k \max = |m'_2| - |m_2| - J \\ q(k, m_2, m'_2, J) = (-1)^k \binom{|m'_2| - |m_2| - J}{k} \end{array} \right\}$$

senão se,

$$(|m'_2| - |m_2| - J) < 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} k \max = \text{arbitrário} , \\ q(k, m_2, m'_2, J) = \binom{-|m'_2| + |m_2| + J + k - 1}{k} \end{array} \right\}.$$

Então, o termo de acoplamento fica:

$$\begin{aligned} D(x, M, m'_1, m_1) &= R (1 + x^2) \sum_{J=0}^{J \max} 2^{3+J+|m'_1|-|m_1|} C^\mu(M, m_1, m'_1, J) \times \\ &\times \sum_{k=0}^{k \max} q(k, m_1, m'_1, M, J) x^{2k+1+J+|m'_1|-|m_1|} . \end{aligned} \quad (3.28)$$

A expressão resultante para $D(x, M, m'_1, m_1)$ pode ser escrita como:

$$D(x, M, m'_1, m_1) = \sum_{i=0}^{Nd} Q_I(i, m'_1, m_1, M) x^i. \quad (3.29)$$

A (Eq.3.23) é resolvida pela expansão da solução em séries de potências de x , como:

$$\tilde{H}_{M, m_1, m_2}^{\mu}(R; x) = A(\mu, m_1, m_2, n) x^n. \quad (3.30)$$

Substituindo a expansão (Eq.3.30) na equação diferencial (Eq.3.23) obtem-se a relação de recorrência para os coeficientes da série:

$$\begin{aligned} & -[n(n+1)Q_2(1) + (n+1)Q_1(0)] A(n+1) = \sum_{i=0}^{Nc} Q_0(i) A(n-i) + \\ & + \sum_{i=1}^{Nb} Q_1(i) A(n+1-i) + \sum_{i=2}^{Na} (n+1-i)(n+2-i) Q_2(i) A(n+2-i) - \\ & - \sum_{m'_1} \sum_{i=i_{min}}^{i_{max}} Q_I(i, m'_1) A(n-1-i) - \sum_{m'_1} \sum_{i=i_{min}}^{i_{max}} Q_I(i, m'_1) A(n-3-i). \end{aligned} \quad (3.31)$$

A série resultante converge rapidamente.

Finalmente, impõem-se as condições de contorno devidas ao princípio de exclusão de Pauli, (Eq.3.18) e (Eq.3.19), para $x = x_0$:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{M, m_1, m_2}^{\mu}(R; x_0) &= (-1)^S \tilde{H}_{M, m_2, m_1}^{\mu}(R; x_0) \\ \frac{d}{dx} \tilde{H}_{M, m_1, m_2}^{\mu}(R; x) \big|_{x=x_0} &= (-1)^{S+1} \frac{d}{dy} \tilde{H}_{M, m_2, m_1}^{\mu}(R; y) \big|_{y=x_0}. \end{aligned}$$

As condições de contorno acima determinam os autovalores da equação angular, $U_{\mu}(R)$.

Capítulo 4

A Equação Radial: Energias de Ligação

4.1 A Equação Radial com Campo Magnético

A equação de Schrödinger nas coordenadas hipersféricas não é completamente separável. A separação adiabática nessas coordenadas é obtida pela expansão da função de onda total do sistema na base completa formada pelas funções de canal:

$$\psi(R, \Omega) = \sum_{\mu} F_{\mu}(R) \Phi_{\mu}(R; \Omega). \quad (4.1)$$

As funções de canal $\Phi_{\mu}(R; \Omega)$ são soluções do operador angular $\hat{U}_{RN}(R; \Omega)$, o qual depende linearmente da coordenada radial R . Considerando R como um parâmetro, suas autofunções e autovalores são funções da coordenada radial. Com a separação adiabática obtêm-se um conjunto de equações radiais acopladas:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{U_{\mu}(R) + 1/4}{R^2} - \frac{\gamma^2 R^2}{4} + 2E_B \right] F_{\mu}(R) + \sum_{\nu} \left[2P_{\mu\nu}(R) \frac{d}{dR} + Q_{\mu\nu}(R) \right] F_{\nu}(R) = 0, \quad (4.2)$$

onde os termos de acoplamento das equações radiais, $P_{\mu\nu}(R)$ e $Q_{\mu\nu}(R)$, são dados por:

$$P_{\mu\nu}(R) = \int \Phi_{\mu}^*(R; \Omega) \frac{\partial}{\partial R} \Phi_{\nu}(R; \Omega) d\Omega \quad (4.3)$$

e:

$$Q_{\mu\nu}(R) = \int \Phi_{\mu}^*(R; \Omega) \frac{\partial^2}{\partial R^2} \Phi_{\nu}(R; \Omega) d\Omega. \quad (4.4)$$

Tendo sido calculadas as curvas de potencial e as funções de canal, os acoplamentos não adiabáticos podem ser obtidos. Expressões adequadas a um cálculo numérico eficiente desses acoplamentos podem ser obtidas com a utilização da equação de autovalores para o operador angular. Derivando em relação a R a equação (Eq.2.16), multiplicando por $\Phi_{\nu}(R; \Omega)$ e integrando nas variáveis angulares Ω , obtem-se a equação:

$$P_{\mu\nu}(R) = -\frac{\langle \Phi_{\mu} | C(\Omega) | \Phi_{\nu} \rangle}{U_{\mu} - U_{\nu}}, \quad \mu \neq \nu, \quad (4.5)$$

onde $C(\Omega)$ no elemento de matriz é o termo de interação coulombiana entre as partículas. Esta equação não envolve a derivada da função de canal, o que permite um cálculo numérico eficiente do acoplamento. Semelhantemente, repetindo o procedimento anterior para a derivada segunda da (Eq.2.16), obtem-se a equação:

$$Q_{\mu\nu}(R) = \frac{d}{dR} P_{\mu\nu}(R) - \sum_{\lambda} P_{\mu\lambda}(R) P_{\nu\lambda}(R). \quad (4.6)$$

As energias e as funções radiais são obtidas pela resolução do sistema de equações diferenciais radiais acopladas (Eq.4.2). Esse sistema é resolvido numericamente utilizando os acoplamentos não adiabáticos e as curvas de potencial calculadas previamente. As soluções dependem do comportamento da equação radial nos limites $R \rightarrow 0$ e $R \rightarrow \infty$. Inicialmente, a função radial $F_{\mu}(R)$ é obtida analiticamente nos limites $R \rightarrow 0$ e $R \rightarrow \infty$. Posteriormente, essas expressões analíticas são usadas como condições iniciais para a propagação numérica das soluções até um valor de R_{match} , onde condições de continuidade são impostas para a função radial e sua derivada, sendo assim obtidas as energias de ligação e as funções de onda radiais. Em princípio, as energias estarão mais próximas do valor exato quanto maior for o número de equações acopladas utilizadas na solução do

sistema de equações, mas as condições iniciais de propagação terão grande influência na precisão numérica com que essas energias são obtidas. Sendo assim, a precisão numérica pode ser aumentada com o uso de expressões analíticas para as condições iniciais.

4.1.1 A Solução na Origem

O sistema de equações radiais (Eq.4.2) pode ser resolvido para $R = 0$ pela expansão da curva de potencial $U_\mu(R)$ e dos acoplamentos não-adiabáticos em séries de Taylor em torno da origem:

$$U_\mu(R) = U_\mu(0) + R \left. \frac{dU_\mu(R)}{dR} \right|_{R=0} + \dots, \quad (4.7)$$

onde o valor da curva de potencial na origem é dado por:

$$U_\mu(0) = -(m_1 + m_2 + 2\lambda + 1)^2 = -m_\mu^2, \quad (4.8)$$

conforme visto na Seção 3.2 . Os acoplamentos são regulares na origem e suas expansões são dadas por:

$$P_{\mu\nu}(R) = P_{\mu\nu}(0) + R \left. \frac{dP_{\mu\nu}(R)}{dR} \right|_{R=0} + \dots \quad (4.9)$$

e

$$Q_{\mu\nu}(R) = Q_{\mu\nu}(0) + R \left. \frac{dQ_{\mu\nu}(R)}{dR} \right|_{R=0} + \dots, \quad (4.10)$$

onde os valores na origem são dados numericamente pelo cálculo das equações (Eq.4.3) e (Eq.4.4) .

Substituindo as equações (Eq.4.7) e (Eq.4.10) no sistema de equações radiais (Eq.4.2), a equação radial desacoplada, no limite $R \rightarrow 0$ torna-se:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{-m_\mu^2 + 1/4}{R^2} + Q_{\mu\mu}(0) + 2E_B \right] F_\mu(R) = 0, \quad (4.11)$$

onde as derivadas da curva de potencial e do acoplamento não foram levadas em conta por serem numericamente desprezíveis. O acoplamento $P_{\mu\mu}$ é nulo para a equação desacoplada.

A (Eq.4.11) possui uma singularidade $[(-m_\mu^2 + 1/4)/R^2]$ para $R = 0$. Expandindo a função de onda radial $F_\mu(R)$ em série de potências,

$$F_\mu(R) = R^{S_\mu} \sum_n a_n R^n, \quad (4.12)$$

e substituindo na (Eq.4.11), obtem-se a equação:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{2S_\mu}{R} \frac{d}{dR} + \frac{S_\mu(S_\mu - 1) - m_\mu^2 + 1/4}{R^2} + Q_{\mu\mu}(0) + 2E_B \right] a_n R^n = 0.$$

A singularidade é eliminada pela escolha do valor de S_μ como:

$$S_\mu = m_\mu + 1/2. \quad (4.13)$$

Assim, obtem-se a relação de recorrência para os coeficientes da série:

$$a_{n+2} = - \frac{2E + Q_{\mu\mu}(0)}{(n+2)(n+2+2m_\mu)} a_n. \quad (4.14)$$

Para o sistema de N equações acopladas resultante do truncamento da (Eq.4.2), a função de onda é propagada numericamente a partir de $R = 0$ a partir da expansão:

$$F_\mu(R) = R^{S_{\hat{\mu}}} \sum_n a_n^{\mu\hat{\mu}} R^n, \quad (4.15)$$

onde o índice $\hat{\mu}$ denota uma solução particular.

4.1.2 A Solução Assintótica

Com o objetivo de obterem-se condições de contorno analíticas para o sistema de equações radiais no limite $R \rightarrow \infty$, é tomado o limite assintótico das curvas de potencial $U_\mu(R)$, conforme visto na (Seção 3.3),

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{U_\mu(R)}{R^2} = \frac{4Z^2}{N_\mu^2} + \frac{2(Z-1)}{R} + \frac{U_\mu^{(2)}}{R^2} + \dots,$$

onde N_μ é o número quântico principal do átomo de hidrogênio em duas dimensões.

Os acoplamentos não-adiabáticos são expandidos em séries de potências de $1/R$:

$$P_{\mu\nu}(R) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{P_{\mu\nu}^{(n)}}{R^n},$$

e

$$Q_{\mu\nu}(R) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{Q_{\mu\nu}^{(n)}}{R^n}.$$

No limite assintótico $R \rightarrow \infty$, o sistema de equações radiais (Eq.4.2), na forma desacoplada, fica:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{U_\mu^{(2)} + Q_{\mu\mu}^{(2)} + 1/4}{R^2} - \frac{\gamma^2 R^2}{4} + 2E \right] F_\mu(R) = 0, \quad (4.16)$$

onde:

$$2E = 2E_B + 4/N_\mu^2 = -k_\mu^2 \quad (4.17)$$

e foram tomados termos até segunda ordem em $1/R$.

Para campo magnético nulo ($\gamma = 0$), a (Eq.4.16) fica:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{U_\mu^{(2)} + Q_{\mu\mu}^{(2)} + 1/4}{R^2} + 2E \right] F_\mu(R) = 0, \quad (4.18)$$

Para o sistema ligado, a função de onda deve ser nula para $R \rightarrow \infty$. Assim, escreve-se a solução como:

$$F_\mu(R) = R^{S_\mu} e^{-k_\mu R} f_\mu(R) \quad (4.19)$$

Substituindo a (Eq.4.19) na equação radial (Eq.4.18), obtém-se a equação diferencial para $f_\mu(R)$:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \left(\frac{2S_\mu}{R} - 2k_\mu \right) \frac{d}{dR} - \frac{2S_\mu}{k_\mu} + \frac{S_\mu^2 - S_\mu + U_\mu^{(2)} + Q_{\mu\mu}^{(2)} + 1/4}{R^2} \right] f_\mu(R) = 0.$$

Expandindo $f_\mu(R)$ em série de potências e calculando a relação de recorrência para os coeficientes, obtém-se a solução analítica assintótica para a equação radial desacoplada com campo nulo.

Para o sistema de N equações radiais acopladas, propaga-se numericamente a função de onda a partir da expansão:

$$F_\mu(R) = R^{S_\mu} e^{-k_\mu R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n^{\mu\mu}}{R^n}. \quad (4.20)$$

Substituindo essa expansão na (Eq.4.2), a relação de recorrência para os coeficientes da série é obtida.

Com o campo magnético ($\gamma \neq 0$), o segundo termo da (Eq.4.16), comparado com o termo quadrático no campo, é pequeno e pode ser desprezado. A equação resultante é a equação diferencial do oscilador harmônico unidimensional:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} - \frac{\gamma^2 R^2}{4} + 2E \right] F_\mu(R) = 0, \quad (4.21)$$

com soluções:

$$F_n^\mu(R) = C_n^\mu H_n(\sqrt{\gamma/2}R) e^{(-\gamma R^2/4)}, \quad (4.22)$$

e autovalores:

$$E_n = 2\gamma(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots. \quad (4.23)$$

A constante de normalização é dada por $C_n^\mu = [(\sqrt{\gamma/2\pi})/2^n n!]$ e $H_n(\sqrt{\gamma/2}R)$ são os polinômios de Hermite.

Estes estados discretos são os níveis de Landau, devido ao confinamento magnético do movimento dos elétrons em um plano perpendicular ao campo. A equação (Eq. 4.23) é a energia para um elétron. Para o sistema bidimensional de dois elétrons, os níveis de Landau são dados por:

$$E_n = 2\gamma(2n + 1) , \quad n = 0, 1, 2, \dots .$$

Os estados ligados tem energias abaixo do primeiro nível de Landau ($n = 0$), pois suas energias devem ser menores que a energia de um doador neutro mais a energia de um elétron livre no primeiro nível de Landau.

Assim, as soluções das equações radiais, $F_\mu(R)$, são obtidas analiticamente nos limites $R \rightarrow 0$, (Seção 4.1.1), e $R \rightarrow \infty$. Essas expressões analíticas são usadas como condições iniciais para a propagação numérica das soluções até um valor de R_{match} , onde condições de continuidade são impostas, obtendo-se as energias de ligação e as funções de onda radiais.

Capítulo 5

Resultados: Curvas de Potencial e Energias

Neste capítulo são mostrados os resultados dos cálculos das energias para o sistema D^- em duas dimensões, na presença de um campo magnético externo. O estado fundamental $M = 0$ e o primeiro estado excitado para $M = 1$ são obtidos em função do campo magnético, bem como a energia de transição de $M = 0$ para $M = 1$.

5.1 Análise Numérica

O procedimento adiabático hiperesférico apresentado anteriormente é exato. Entretanto, para o cálculo das energias de ligação do sistema, algumas aproximações terão de ser feitas. Primeiramente, a expansão da função de onda total na base das funções de canal, (Eq.2.18), é truncada a um número máximo de canais angulares, μ_{max} , limitando, assim, o número de equações radiais acopladas, (Eq.2.19). Também, a expansão das funções de canal na base das autofunções do operador de momento angular, (Eq.3.2), é truncada, limitando o número de componentes de momento angular m_1 e m_2 a um número máximo N_c . A última aproximação a ser feita é limitar o número de termos da expansão da interação $e - e$ nos polinômios de Legendre, (Eq. I.3), a um número máximo J_{max} .

Inicialmente, as funções de canal e as curvas de potencial são calculadas através da resolução do algoritmo numérico para a relação de recorrência (Eq.3.31), em um

intervalo do raio hipersférico $0 \leq R \leq R_{max}$. Cada curva de potencial e função de canal é rotulada pelo índice $\mu = \{m_1, m_2, \lambda\}$, o qual é relacionado ao conjunto dos números quânticos obtidos na solução exata do operador angular para $R = 0$, os harmônicos hipersféricos (Eq.3.10). Na figura (Fig.5.1) são mostradas as primeiras curvas de potencial para $M = 0$. A curva mais baixa ($\mu = 1$) tem um mínimo, semelhante às curvas de potencial moleculares. Esta curva apresenta somente um nível de energia, correspondendo ao estado fundamental do sistema.

Figura 5.1: Curvas de potencial $\mu = 1$ e $\mu = 2$ do sistema D^- para $M = 0$. A curva mais baixa ($\mu = 1$) converge para o limiar de ionização do H ($N=1$) em (2D). Ela comporta somente um estado ligado $E = -4.4816Ry$. A segunda curva ($\mu = 2$) não tem estados ligados.

Para a análise do efeito da interação $e - e$, foram calculados alguns valores da primeira curva de potencial ($\mu = 1$) em alguns valores de R . A convergência dos resultados com J_{max} , para $N_c = 7$, é mostrada na (Fig.5.2):

Figura 5.2: Curva de potencial ($\mu=1, M=0$) calculada para $J_{\max}=10, 12, 14, 16$ e 18 . O valor do mínimo da curva aumenta com $J_{\max}$.

A convergência com $J_{\max}$ é maior conforme R aumenta pois, para grandes valores de R , um elétron está afastado da impureza enquanto o outro permanece próximo à mesma, levando a uma redução da interação $e-e$.

Também foi feita uma análise da convergência da primeira curva de potencial com o número de componentes angulares N_c . A Tabela 5.1 e a Figura 5.3 mostram a convergência do mínimo da curva de potencial em relação à N_c e $J_{\max}$:

Tabela 5.1: Convergência do mínimo da primeira curva de potencial ($M=0$) em relação ao número de componentes angulares N_c e termos de acoplamento da interação elétron-elétron $J_{\max}$.

$J_{\max} \backslash N_c$	1	3	7	9
5	1.22325493755	1.25308721297	1.25638670170	1.25651080450
10	1.19566300217	1.22901351303	1.23379589226	1.23415485983
15	1.18900225957	1.22470856803	1.22996390531	1.23038064920
20	1.18363911724	1.22012974368	1.22572784432	1.22620622726
25	1.18146704986	1.21874372296	1.22448338489	1.22497025960
30	1.18133466042	1.21852778154	1.22429486094	1.22479634900

Figura 5.3: Convergência da primeira curva de potencial para $M=0$ em relação à N_c . O mínimo é abaixado conforme N_c aumenta.

Na região de mínimo, a variação do valor da curva com N_c é maior. Quanto maior o número de componentes angulares, mais baixo é o valor do mínimo da curva.

Os efeitos de $J_{\max}$ e N_c sobre a energia do estado fundamental com ($B = 0$), na aproximação *EUAA*, é mostrado na Tabela 5.2:

Tabela 5.2: Convergência da energia do estado fundamental na aproximação *EUAA* (R_y), em relação à $J_{\max}$ e N_c .

$J_{\max} \backslash N_c$	1	3	7	9
20	-4.455961046	-4.561650904	-4.576013752	-4.577180840
25	-4.452334010	-4.559820918	-4.574451972	-4.575626634
30	-4.452119584	-4.559350226	-4.574064894	-4.575278198
35	-4.452119584	-4.559350226	-4.574043414	-4.575248746

Os resultados da Tabela 5.2 mostram que a convergência da energia é rápida, sendo de cinco dígitos significativos para $J_{\max} = 35$ e $N_c = 9$. Com base nesses resultados, esses valores para $J_{\max}$ e N_c são usados ao longo desse trabalho no cálculo das energias.

5.2 Energias de Ligação

A aproximação adiabática produz curvas de potencial e funções de canal como soluções da equação angular hipersférica, relacionadas ao conjunto de números quânticos $\mu = \{m_1, m_2, \lambda\}$. Os níveis de energia resultam da solução do conjunto de equações radiais acopladas, onde os acoplamentos não-adiabáticos são obtidos a partir das funções de canal. Quando os acoplamentos são desprezados, cada curva de potencial têm associado a ela autoestados que são independentes das outras curvas de potencial e funções de canal. A importância da escolha de coordenadas hipersféricas para a descrição de sistemas atômicos reside no fato que a variável hiperradial R é um bom parâmetro adiabático, assim refletido na pequena contribuição dos acoplamentos não-adiabáticos para as energias calculadas. Dessa forma, a introdução dos acoplamentos produz resultados muito precisos com somente poucos canais radiais acoplados.

A energia do estado fundamental do íon D^- em duas dimensões foi calculada sem a presença do campo magnético. O resultado variacional preciso de Phelps e Bajaj [8] é usado como comparação. Os resultados são mostrados na Tabela 5.3:

Tabela 5.3: *Convergência da energia do estado fundamental para o íon D^- . O resultado variacional da Ref. [8] é usado como comparação.*

$E_{var} =$	$-4.4801 Ry$	
$E_{UAA} =$	$-4.47465 Ry$	$(\mu_{max} = 1)$
$E_{CAA} =$	$-4.48150 Ry$	$(\mu_{max} = 2)$
$*E_{CAA} =$	$-4.48167 Ry$	$(\mu_{max} = 3)$
$E_{EUAA} =$	$-4.57536 Ry$	$(\mu_{max} = 1)$

Esses resultados mostram que sem a inclusão de nenhum acoplamento obtém-se um limite inferior para o valor da energia, (E_{EUAA}), e com a inclusão do acoplamento Q_{11} , mostrado na (Fig.5.4), tem-se um limite superior, (E_{UAA}).

Figura 5.4: Acoplamento não adiabático diagonal $Q_{11}(R)$ para $\mu = 1$. A inclusão desse acoplamento determina o limite superior E_{UAA} para a energia do estado fundamental.

Desde que o efeito de Q_{11} é pequeno, o valor exato da energia, E , fica restrito a um intervalo com um erro da ordem de 2%. Com a inclusão dos acoplamentos não-diagonais, o erro cai rapidamente e a energia (E_{CAA}) aproxima-se do valor exato, conforme a relação mostrada no Cap. 2, (Eq.2.22).

As energias nas aproximações (E_{EUAA}) e (E_{UAA}) têm limitado corretamente a energia variacional E_{var} , e o valor (E_{UAA}) difere do variacional por somente 0.1%, o qual é um excelente resultado, considerando que somente uma simples equação radial desacoplada foi resolvida. Acoplando-se três canais radiais, o erro cai para 0.03% e o valor da energia, (E_{CAA}), é mais preciso que o valor variacional.

Phelps e Bajaj [8] testaram a precisão das funções de onda variacionais usadas

calculando a energia do estado fundamental do íon H^- , levando a um valor de $E_{var}^{H^-} = -1.05534 Ry$. O valor variacional mais preciso é o de Pekeris [42], $E_{var}^{H^-} = -1.0555 Ry$. O resultado obtido neste trabalho, para três canais radiais acoplados, é $E_{HAA}^{H^-} = -1.05542 Ry$, o qual também é mais preciso que o valor variacional de Phelps e Bajaj [8], atestando, assim, a precisão dos resultados obtidos.

Como resultado do confinamento, a energia do estado fundamental para o sistema $2D$ ($-4.4816 Ry^*$) é cerca de 4.2 vezes maior que a energia do sistema $3D$ ($-1.0555 Ry^*$).

Na Ref. [17], onde foi feita a diagonalização com 144 termos angulares (harmônicos hiperesféricos), o resultado para a energia do estado fundamental é $-4.48048 Ry^*$. Já na Ref. [18], onde a expansão adiabática foi feita usando a mesma base angular e radial (polinômios de Laguerre), a energia na aproximação adiabática extrema é $-4.524 Ry^*$ e com o acoplamento diagonal (Q_{11}) o resultado é $-4.478 Ry^*$. Note-se que a convergência é lenta, sendo necessário a inclusão de muitos termos na expansão da função de onda angular. Além disso, na Ref. [17], a função de onda depende de um parâmetro arbitrário.

A energia de ligação do sistema é a energia requerida para tornar um dos elétrons livre, com o doador neutro, D^0 , permanecendo no estado fundamental. Para o íon D^- em duas dimensões, essa energia é de $0.4816 Ry^*$. Para um íon D^- localizado no centro de um poço de potencial retangular (a energia de ligação depende da localização da impureza), com largura de poço $L = 100 \text{ \AA}$, o resultado experimental de Huant et al [2] fornece um valor de $0.34 Ry^*$, cerca de 30% menor que o valor em $2D$. Assim, vê-se que a largura do poço tem uma influência considerável sobre as energias de ligação do sistema. Quando a largura do poço diminui, a energia de ligação aumenta. Isto é compreensível, visto que os elétrons são mantidos mais próximos ao centro atrativo pelas paredes do poço, experimentando uma energia potencial maior que na ausência do poço. Assim, quanto mais confinado for

o sistema, maior será sua energia de ligação.

Para ter-se uma idéia do tamanho do sistema, a função de onda radial para o estado fundamental é mostrada na figura (Fig.5.5):

Figura 5.5: Função de onda radial do estado fundamental. O tamanho do sistema é da ordem de $1 \text{ a.u.} = a_0^* \simeq 103,6 \text{ \AA}$ para o GaAs.

A função de onda está localizada para $R \simeq 1 \text{ a.u.}$. Com os valores da massa efetiva $m^* \simeq 0,067$ e da constante dielétrica $\epsilon \simeq 13,1$ para o GaAs, obtem-se o raio de Bohr efetivo $a_0^* \simeq 103,6 \text{ \AA}$, dando uma medida do tamanho do sistema para um semiconductor. Para larguras de poço $L \gg a_0^*$ o sistema estará muito pouco confinado. Para $L \simeq a_0^*$ e altura da barreira muito grande, o movimento em z dos elétrons torna-se forçado pelas paredes do poço de potencial e o confinamento é considerável.

Uma forma de se confinar o sistema no plano $x - y$ é através da introdução de um campo magnético. Na (Fig.5.6) são mostradas as primeiras curvas de potencial, sem campo magnético, para $M = 0$ e $M = 1$:

Figura 5.6: Curvas de potencial mais baixas ($\mu = 1$) para $M = 0$ e $M = 1$. Para momento angular total $M = 0$ há somente um estado ligado enquanto que para $M = 1$ a curva tem um comportamento anti-ligante, não havendo estados ligados.

Para $M = 0$, a curva de potencial tem um mínimo, semelhante às curvas de potencial moleculares. Esta curva apresenta somente um nível de energia, correspondendo ao estado fundamental do sistema.

Para $M = 1$ as curvas de potencial comportam-se como curvas de potencial moleculares de orbitais anti-ligantes. A curva não tem mínimo e, assim, têm-se somente estados no contínuo. Isso é devido à uma blindagem mais efetiva da carga nuclear por um dos elétrons quando comparado com o sistema tridimensional equivalente. Sendo assim, não haverá transição de dipolo elétrico de $M = 0$ para $M = 1$. Entretanto, esta transição pode ser conseguida com a introdução de um campo magnético externo, como será analisado a seguir.

5.3 Energias de Ligação no Campo Magnético

Com a solução hipersférica para o estado fundamental do D^- bem estabelecida, pode-se, agora, introduzir o campo magnético. Na presença de um campo magnético, as energias de ligação são uma função do campo.

Na equação de Schrödinger hipersférica (Eq.2.8), a interação das partículas com o campo magnético está contida em um termo linear com o campo, γM , o qual é proporcional ao momento angular total do sistema, $M = m_1 + m_2$, e em um termo quadrático com o campo, $\gamma^2 R^2/4$, o qual depende somente da coordenada radial R . Assim, as curvas de potencial, obtidas na seção anterior, não são afetadas pelo potencial parabólico adicionado ao hamiltoniano devido ao campo. O potencial total para a equação radial corresponderá, então, à soma da curva de potencial com o termo parabólico, como mostrado na figura (Fig.5.7):

Figura 5.7: O efeito do termo de potencial parabólico devido ao campo magnético é adicionado à curva mais baixa ($\mu = 1$) para $M = 0$.

Observa-se que o campo magnético muda o limiar de ionização do sistema, que agora passa a depender do campo. O novo limiar de ionização é o primeiro nível de Landau e os estados ligados devem ter energias abaixo desse nível.

O efeito do campo magnético sobre a primeira curva de potencial para $M = 1$ é mostrado na figura (Fig.5.8):

Figura 5.8: O efeito do termo de potencial parabólico devido ao campo magnético é adicionado à curva mais baixa ($\mu = 1$) para $M = 1$. A curva deixa de ser anti-ligante devido ao campo.

A presença do potencial parabólico devido ao campo magnético faz com que estados para $M = 1$ que antes tinham energias no contínuo sejam ligados.

A energia do estado fundamental $M = 0$ para diferentes valores de γ é mostrada na tabela (Tab.5.4). Os valores estão calculados nas aproximações EUAA, UAA e CAA até três canais radiais acoplados:

Tabela 5.4: *Convergência da energia (HAA) do estado fundamental $M = 0$, em função do campo magnético, comparada com o resultado variacional da referência [12], em Rydbergs (Ry).*

γ	E_{EUAA}	E_{UAA}	$E_{CAA}(\mu_{max} = 2)$	$E_{CAA}(\mu_{max} = 3)$	E_{var}
0.0	-4.575361	-4.474651	-4.481501	-4.481668	-4.478
0.5	-4.440382	-4.339634	-4.347200	-4.347404	-4.346
1.0	-4.132499	-4.035238	-4.042433	-4.042684	-4.042
2.0	-3.258710	-3.170252	-3.175104	-3.175425	-3.172
4.0	-0.999903	-0.922835	-0.924967	-0.925373	-0.917

A energia do primeiro estado excitado $M = 1$ em função do campo magnético é mostrada na tabela (Tab.5.5):

Tabela 5.5: *Convergência da energia (HAA) do primeiro estado excitado para $M = 1$, em função do campo magnético, em (Ry). Os resultados são comparados com o resultado variacional da referência [12].*

γ	E_{EUAA}	E_{UAA}	$E_{CAA}(\mu_{max} = 2)$	$E_{CAA}(\mu_{max} = 3)$	E_{var}
0.5	-3.492268	-3.420811	-3.426676	-3.427098	-3.430
1.0	-2.875823	-2.769353	-2.784363	-2.784750	-2.789
2.0	-1.506703	-1.364191	-1.395346	-1.396529	-1.399
4.0	1.493931	1.659955	1.61159	1.608605	1.615

Os resultados com campo magnético estão em boa concordância com o resultado variacional de Larsen et al [12], mostrando a mesma convergência observada para o estado fundamental no caso de campo magnético nulo ($\gamma = 0$). A inclusão dos acoplamentos não-adiabáticos para até três canais acoplados tem limitado a energia a um intervalo com erro de somente 2%. Para $M = 0$, os valores hipereféricos são menores que os variacionais para todos os valores de γ . Para $M = 1$, os resultados na aproximação hiperesférica concordam com os resultados variacionais de Larsen [12] em até três dígitos significativos.

Os valores hipersféricos para as energias do estado fundamental $M = 0$ e do primeiro estado excitado $M = 1$, em função do campo magnético, são mostrados na (Fig.5.9):

Figura 5.9: As energias do estado fundamental $M = 0$ e do primeiro estado excitado para $M = 1$ em função do campo magnético.

Observa-se que a energia varia continuamente com o campo, devido ao confinamento magnético. A partir de $\gamma = 2$ a variação é linear, mostrando o predomínio da energia magnética sobre a energia de Coulomb.

A energia de ligação de um sistema de dois elétrons no campo magnético é a energia requerida para que um dos elétrons faça uma transição para o primeiro nível de Landau ($n=0$), sendo que o átomo neutro permanece no estado fundamental. Para o íon D^- em duas dimensões, a energia de ligação de um elétron é dada por $E_l = E_{D^0} + \gamma - E_{D^-}$, onde E_{D^0} e E_{D^-} são as energias do estado fundamental do doador neutro e do íon, respectivamente, no campo magnético e γ corresponde à energia do primeiro nível de Landau $n = 0$ (em Ry^*), conforme a equação (Eq. 4.23), para um elétron livre no campo.

Os valores experimentais para as energias de ligação do D^- foram primeiramente obtidos por Huant, Najda e Etienne [2] em 1990. Foram medidas as transições do sistema para o primeiro nível de Landau $n = 0$ em um poço retangular de largura $L = 100 \text{ \AA}$ no $GaAs$. Na tabela (Tab.5.6) e na figura (Fig.5.10) estão mostrados esses valores, bem como os resultados variacionais da referência [12] e os valores HAA:

Tabela 5.6: *Energia de ligação de um elétron para o D^- em função do campo magnético. Os valores hiperesféricos são comparados com os resultados variacionais de Larsen [12] para o sistema 2D e com os valores experimentais da referência [2] para um poço de largura $L = 100 \text{ \AA}$. As energias são dadas em meV.*

$B(T)$	$E_{D^0} + \gamma$	E_l^{HAA}	E_l^{var}	$E_{D^- \rightarrow n=0}^{exp}$
0.0	-23.200	2.794	2.772	2.0
3.35	-20.166	5.048	5.040	—
3.75	—	—	—	4.2
5.00	—	—	—	4.9
6.71	-16.878	6.570	6.567	—
7.68	—	—	—	5.78
10.9	—	—	—	6.12
13.42	-9.698	8.720	8.700	—
14.3	—	—	—	6.72
20.36	—	—	—	7.61
26.84	-6.276	11.643	11.594	—

No cálculo dos valores da energia de ligação hiperesférica E_l^{HAA} foram usados os valores variacionais da referência [12] para a energia E_{D^0} do estado fundamental do doador neutro no campo.

Os valores hiperesféricos estão em muito boa concordância com os valores variacionais. Já em relação aos valores experimentais, a energia de ligação é maior devido à aproximação estritamente bidimensional. Extrapolando-se a curva experimental para campo nulo obtem-se uma energia de ligação para o D^- no poço de aproximadamente 2 meV , a qual é cerca de 0.8 meV menor que o valor bidimensional calculado. Essa diferença se mantém para campos baixos, mas aumenta à medida em que o campo aumenta.

Figura 5.10: Energia de ligação do D^- no campo magnético. A curva suave são os valores HAA para o sistema estritamente bidimensional, os pontos são os valores variacionais da referência [12] enquanto que a curva pontilhada são os valores experimentais para largura de poço $L = 100$ Å. Essas energias são as transições ($D^- \rightarrow n = 0$) do estado fundamental $M = 0$ para o primeiro nível de Landau. Para o GaAs, $B = 6.71\gamma$ (T) e $Ry^* = 5.8$ meV.

A energia de transição $M = 0 \rightarrow M = 1$ (ΔE) para três canais radiais acoplados é mostrada na (Fig.5.11), na tabela (Tab.5.7) e comparada com os resultados da literatura:

Figura 5.11: A energia de transição $M = 0 \rightarrow M = 1$ em função do campo magnético.

Na figura (Fig.5.11) também estão mostrados, para efeito de comparação, os resultados variacionais das energias de transição, tomados da referência [12].

Tabela 5.7: *Comportamento das energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado do D^- , bem como da energia de transição, em função do campo magnético.*

γ	$E (M = 0)(Ry)$	$E (M = 1)(Ry)$	$\Delta E (Ry)$
0.0	-4.481668	—	—
0.1	-4.475304	-3.894588	0.580716
0.2	-4.457091	-3.783417	0.673674
0.3	-4.428722	-3.667986	0.760736
0.4	-4.391751	-3.549027	0.842724
0.5	-4.347404	-3.427098	0.920306
0.6	-4.296643	-3.302623	0.994020
0.7	-4.240228	-3.175926	1.064302
0.8	-4.178773	-3.047257	1.131516
0.9	-4.112784	-2.916812	1.195972
1.0	-4.042684	-2.784750	1.257934
1.1	-3.968833	-2.651201	1.317632
1.2	-3.891538	-2.516276	1.375262
1.3	-3.811066	-2.380069	1.430997
1.4	-3.727651	-2.242661	1.484990
1.5	-3.641498	-2.104125	1.537373
1.6	-3.552790	-1.964524	1.588266
1.7	-3.461690	-1.823914	1.637776
1.8	-3.368344	-1.682348	1.685996
1.9	-3.272882	-1.539872	1.733010
2.0	-3.175425	-1.396529	1.778896
4.0	-0.925373	1.608605	2.533978

Os valores da energia de transição ΔE estão em boa concordância com o resultado variacional de Larsen et al [12], mostrando a consistência e precisão do procedimento adiabático hiperesférico desenvolvido neste trabalho.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho, o método adiabático hiperesférico (HAA) foi aplicado ao cálculo das energias de estados ligados do íon D^- em semicondutores, na aproximação em que o sistema é estritamente bidimensional. As energias foram calculadas em função de um campo magnético homogêneo aplicado na direção perpendicular ao plano de confinamento dos elétrons. Inicialmente foi calculada a energia do estado fundamental, sem campo magnético. Resolvendo a equação hiperesférica com somente uma curva de potencial e negligenciando todos os acoplamentos não-adiabáticos, foi obtido um valor para a energia com somente 2% de erro em relação ao melhor resultado HAA deste trabalho. Com a inclusão de um único acoplamento diagonal, o erro cai para 0.1%. Com a inclusão, então, de três canais radiais e todos os acoplamentos não-adiabáticos, o erro é de somente 0.03%. Esta energia é menor que o resultado variacional [8], indicando uma maior precisão.

Sem campo magnético há somente um estado ligado, correspondendo ao estado fundamental do sistema. Na presença de um campo magnético, a interação está contida em um termo linear com o campo, o qual é proporcional ao momento angular total do sistema na direção do campo, e em um termo quadrático. Nas coordenadas hiperesféricas, este termo dá origem a um potencial parabólico que depende somente da variável radial, não alterando as curvas de potencial e acoplamentos não-adiabáticos. Esta característica reduz

o trabalho numérico e a acumulação de erros.

Devido ao campo magnético, estados que antes tinham energias no contínuo passam a ser estados ligados. Assim, foram calculadas as energias do estado fundamental $M = 0$ e do primeiro estado excitado $M = 1$ do D^- em função do campo magnético. Os resultados são comparados com os valores variacionais encontrados na literatura [12], mostrando uma concordância muito boa. Para $M = 0$, os valores HAA são menores que os valores variacionais para todos os valores de campo, enquanto que para $M = 1$ concordam em até três dígitos. A inclusão de mais canais radiais e acoplamentos daria um resultado ainda melhor, mas, dentro do objetivo desse trabalho a precisão obtida é suficiente, considerando que a aproximação estritamente bidimensional envolve potenciais bidimensionais, ao invés dos potenciais quasi-bidimensionais, que são mais realísticos.

Para uma estimativa da diferença em energia entre o sistema estritamente bidimensional e o sistema confinado em um poço de potencial, a energia de ligação de um elétron hiperesférico foi comparada com os resultados experimentais [2] para um íon D^- confinado em um poço de potencial de largura $L = 100 \text{ \AA}$. Para campos baixos, os resultados diferem em 40%, aumentando um pouco a diferença à medida em que o campo cresce.

Como sequência natural desse trabalho, a perspectiva futura é a aplicação do método adiabático hiperesférico ao sistema mais realístico quasi-bidimensional. Também, uma propriedade do sistema que pode ser calculada com precisão, devido às funções de onda hiperesféricas serem exatas, são as forças de oscilador, que são relacionadas à intensidade das linhas de transição, o que é experimentalmente importante.

Referências Bibliográficas

- [1] E. R. Mueller, D. M. Larsen, J. Waldman and W. D. Goodhue, Phys. Rev. Lett. **68**, 2204 (1992).
- [2] S. Huant, S. P. Najda and B. Etienne, Phys. Rev. Lett. **65**, 1486 (1990).
- [3] S. Holmes, J.-P. Cheng, B. D. McCombe and W. Schaff, Phys. Rev. Lett. **69**, 2571 (1992).
- [4] C. J. Armistead, S. P. Najda, R. A. Stradling and J. C. Maan, Solid State Commun. **53**, 1109 (1985).
- [5] D. M. Larsen, Phys. Rev. Lett. **42**, 742 (1979).
- [6] S. Huant, A. Mandray, J. Zhu S. G. Louie, T. Pang and B. Etienne, Phys. Rev. B **48**, 2370 (1993).
- [7] J. Kono, S. T. Lee, M. S. Salib, G. S. Herold, A. Petrou and B. D. McCombe, Solid-State Electronics **40**, 93 (1996).
- [8] D. E. Phelps and K. K. Bajaj, Phys. Rev. A **27**, 4883 (1983).
- [9] G. Bastard, Phys. Rev. B. **24**, 4714 (1981).
- [10] T. Pang and S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. **65**, 1635 (1990).
- [11] D. M. Larsen and S. Y. McCann, Phys. Rev. B **45**, 3485 (1992).
- [12] D. M. Larsen and S. Y. McCann, Phys. Rev. B **46**, 3966 (1992).
- [13] A. B. Dzyubenko and A. Yu. Sivachenko, Phys. Rev. B **48**, 14690 (1993).
- [14] J. M. Shi, F. M. Peeters, G. A. Farias, J. A. K. Freire, G. Q. Hai, J. T. Devreese, S. Bednartek and J. Adamowski, Phys. Rev. B. **57**, 3900 (1998).

- [15] J. Blinowski and T. Szwacka, *Phys. Rev. B* **49**, 10231 (1994).
- [16] B. S. Monozon, *Superlattices and Microstructures* **29**, 17 (2001).
- [17] W. Y. Ruan, K. S. Chan and E. Y. B. Pun, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 1329 (2001).
- [18] W. Y. Ruan, K. S. Chan and E. Y. B. Pun, *Phys. Rev. B* **63**, 205204 (2001).
- [19] L X Wang, X J Kong, Y X Li and S J Xi, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 8765 (2001).
- [20] A. S. Santos, J. J. De Groote and L. Ioriatti, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 6841 (2002).
- [21] X. Xia and J. J. Quinn, *Phys. Rev. B* **46**, 12530 (1992).
- [22] A. B. Dzyubenko, *Phys. Lett. A* **165**, 357 (1992).
- [23] A. B. Dzyubenko, A. Mandray, S. Huant, A. Yu. Sivachenko and B. Etienne, *Phys. Rev. B* **50**, 4687 (1994).
- [24] T. Szwacka, J. Blinowski and J. Betancur, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, 4489 (1995).
- [25] J. Macek, *J. Phys. B* **1**, 831 (1968).
- [26] C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **10**, 1986 (1974).
- [27] C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **12**, 493 (1975).
- [28] H. Klar and M. Klar, *Phys. Rev. A* **17**, 1007 (1978).
- [29] C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **14**, 30 (1976).
- [30] Jose E. Hornos, S. W. MacDowel and C. Denise Caldwell, *Phys. Rev. A* **33**, 2212 (1986).
- [31] J. J. De Groote, J. E. Hornos, H. T. Coelho and C. D. Caldwell, *Phys. Rev. B* **46**, 2101 (1992).
- [32] Jian-zhi Tang, Shinichi Watanabe and Michio Matsuzawa, *Phys. Rev. A* **46**, 2437 (1992).
- [33] C. D. Lin, *Phys. Rep.* **257**, 2 (1995).

- [34] M Masili, J. E. Hornos and J. J. De Groote, Phys. Rev. A **52**, 3362 (1995).
- [35] Mauro Masili, J. J. De Groote and J. E. Hornos, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **33**, 2641 (2000).
- [36] J.J. De Groote, M. Masili and J. E. Hornos, Phys. Rev. A **62**, 032508 (2000).
- [37] D. L. Miller and A. F. Starace, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **13**, L525 (1980).
- [38] J. J. De Groote, A. S. dos Santos, M. Masili and J. E. Hornos, Phys. Rev. B **58**, 10383 (1998).
- [39] A. S. dos Santos, M. Masili and J. J. De Groote, Phys. Rev. B **64**, 195210 (2001).
- [40] Anthony F. Starace and Gary L. Webster, Phys. Rev. A **19**, 1629 (1979).
- [41] H. T. Coelho, J. E. Hornos, Phys. Rev. A **43**, 6379 (1991).
- [42] C. L. Pekeris, Phys. Rev. **126**, 1470 (1962).
- [43] V. Mangulis, *Handbook of Series for Scientists and Engineers*, Academic Press (1965).
- [44] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York (1964).

Apêndice I

I. A Interação Elétron-Elétron

As funções de canal $\Phi_\mu(R; \Omega)$ são expandidas em uma base a qual diagonaliza, simultaneamente, os operadores de momento angular $\hat{L}_{z_i}^2$ dos elétrons. O sistema de equações diferenciais angulares resultante dessa expansão, (Eq. 3.4), é infinitamente acoplado pelo termo de interação $e - e$. Esses acoplamentos são dados por:

$$K_{m_1, m_2, m'_1, m'_2}(\alpha) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_1 d\theta_2 \frac{\exp(im'_1 - im_1)\theta_1 \exp(im'_2 - im_2)\theta_2}{\sqrt{1 - \sin 2\alpha \cos(\theta_1 - \theta_2)}}. \quad (\text{I.1})$$

Fazendo-se a mudança de variável $\theta = \theta_1 - \theta_2$, a integral dupla fica:

$$K_{m_1, m_2, m'_1, m'_2}(\alpha) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta_2 \exp[i(m'_1 - m_1 + m'_2 - m_2)\theta_2] \times \\ \times \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\exp(-i\Delta m \theta)}{\sqrt{1 - \sin 2\alpha \cos \theta}}, \quad (\text{I.2})$$

onde $\Delta m = m'_1 - m_1$.

O resultado da integral em θ_2 é dado por:

$$\int_0^{2\pi} d\theta_2 \exp[i(m'_1 - m_1 + m'_2 - m_2)\theta_2] = 2\pi \delta_{m'_1 + m'_2, m_1 + m_2}.$$

Esta integral é não nula somente no caso em que:

$$m_1 + m_2 = m'_1 + m'_2.$$

Isto significa que a interação entre os elétrons somente acopla canais com o mesmo valor

do momento angular total, o qual é definido como:

$$M = m_1 + m_2 .$$

A raiz quadrada na (Eq. I.2) é expandida em termos dos polinômios de Legendre, $P_J(\cos\theta)$:

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{1}{r_>} \sum_{J=0}^{\infty} \left(\frac{r_<}{r_>} \right)^J P_J(\cos\theta) , \quad J=0,1,2,3,\dots . \quad (\text{I.3})$$

Substituindo a expansão anterior na integral angular (Eq. I.2) obtém-se a equação:

$$K_{\Delta m}(\alpha) = \frac{1}{\cos\alpha} \sum_{J=0}^{\infty} (\tan\alpha)^J \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta [\cos(\Delta m\theta) - i \sin(\Delta m\theta)] P_J(\cos\theta) , \quad (\text{I.4})$$

Na (Eq. I.4), a expansão em $\tan\alpha$ é dada no intervalo $0 \leq \alpha < \alpha_0 = \pi/4$, o qual corresponde a $r_1 < r_2$. O valor α_0 corresponde a $r_1 = r_2$. No intervalo $\alpha_0 \leq \alpha \leq \pi/2$, a expansão é dada em $\alpha \rightarrow (\frac{\pi}{2} - \alpha)$, o qual corresponde a $r_2 < r_1$.

Com a expansão dos polinômios de Legendre em funções trigonométricas [43]:

$$P_J(\cos\theta) = \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{\leq J/2} \varepsilon_{(J/2)-k} \frac{\Gamma(k+1/2)\Gamma(J-k+1/2)}{k!(J-k)!} \cos(J-2k)\theta , \quad k = 0, 1, 2, \dots , \quad (\text{I.5})$$

onde:

$$\varepsilon_{(J/2)-k} = \begin{cases} 1 , & (J/2) - k = 0 \\ 2 , & (J/2) - k > 0 \end{cases} ,$$

a (Eq. I.4) fica em função das integrais:

$$\int_0^{2\pi} d\theta \cos(\Delta m \theta) \cos[(J - 2k)\theta] = \begin{cases} \pi \delta_{\Delta m, J-2k}, & \Delta m \neq 0 \\ 2\pi, & \Delta m = J - 2k = 0 \end{cases} ,$$

e:

$$\int_0^{2\pi} d\theta \sin(\Delta m \theta) \cos[(J - 2k)\theta] = 0, \quad \forall \Delta m .$$

Assim, os acoplamentos são dados por:

$$K_{\Delta m}(\alpha) = \frac{1}{\pi} \sum_{J \geq |\Delta m|} \frac{(\tan \alpha)^J}{\cos \alpha} \frac{\Gamma\left(\frac{J-\Delta m+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{J+\Delta m+1}{2}\right)}{\left(\frac{J-\Delta m}{2}\right)! \left(\frac{J+\Delta m}{2}\right)!}, \quad (\text{I.6})$$

com $(J - \Delta m)$ sendo um número par.

Apêndice II

II. As Funções de Canal para $R = 0$ em x

Na Seção 3.2 foram obtidas as soluções do conjunto de equações diferenciais angulares para $R = 0$, as quais são dadas em termos dos polinômios de Jacobi de grau λ :

$$G_{M,m_1,m_2}^\mu(0; \alpha) = (\sin \alpha)^{|m_1|+1/2} (\cos \alpha)^{|m_2|+1/2} P_\lambda^{|m_1|,|m_2|}(\cos 2\alpha). \quad (\text{II.1})$$

onde $\lambda = 0, 1, 2, \dots$. Essas funções são conhecidas como os harmônicos hipersféricos e cada conjunto de números quânticos $\mu = \{m_1, m_2, \lambda\}$ definem uma solução da equação angular.

Os harmônicos hipersféricos, na solução em séries de potências na nova variável $x = \tan(\alpha/2)$, são dados por:

$$G_{M,m_1,m_2}^\mu(0; x) = \left(\frac{2x}{1+x^2} \right)^{|m_1|+1/2} \left(\frac{1-x^2}{1+x^2} \right)^{|m_2|+1/2} P_\lambda^{|m_1|,|m_2|}(\bar{x}), \quad (\text{II.2})$$

onde:

$$\bar{x} = \cos(2\alpha) = 2\cos^2(\alpha) - 1 = 2 \left(\frac{1-x^2}{1+x^2} \right)^2 - 1.$$

A forma explícita dos Polinômios de Jacobi é dada por [44]:

$$P_\lambda^{|m_1|,|m_2|}(\bar{x}) = 2^{-\mu} \sum_{K=0}^{\mu} \binom{\mu + |m_1|}{K} \binom{\mu + |m_2|}{\mu - K} (\bar{x}-1)^{\mu-K} (\bar{x}+1)^K. \quad (\text{II.3})$$

Substituindo a equação (Eq. II.3) na (Eq. II.2) obtêm-se os harmônicos hiperesféricos na variável x , dados por:

$$G_{M,m_1,m_2}^\mu(0; x) = (1+x^2)^{-(|m_1|+|m_2|+2\mu+1)} \sum_{K=0}^{\mu} (-1)^{\mu-K} \binom{\mu+|m_1|}{K} \times \\ \times \binom{\mu+|m_2|}{\mu-K} (2x)^{|m_1|+2(\mu-K)+1/2} (1-x^2)^{|m_2|+2K+1/2} \quad (\text{II.4})$$

Nesta variável, os harmônicos hiperesféricos não tem comportamento polinomial para $R = 0$. Assim, para obter-se esse comportamento, introduz-se o fator $(1+x^2)^S$ na solução para $R = 0$,

$$S = |m_1| + |m_2| + 1 - \sqrt{U_\mu(0)},$$

onde S é definido pela solução angular sendo calculada, como também $U_\mu(0)$, o valor da curva de potencial em $R = 0$.

A inclusão deste fator na função angular faz com que a solução para $R = 0$ seja polinomial e, além disso, faz com que, numericamente, a expansão em séries de potências de x seja rapidamente convergente.

Apêndice III

III. O Íon D^- Quasi-Bidimensional

Considere-se um íon D^- confinado no centro de um poço de potencial de largura L . O eixo z é tomado na direção de crescimento do cristal. A origem do plano $(x - y)$ é escolhida para o doador, o centro de massa, porque todas as posições do doador são equivalentes neste plano. Na presença de um campo magnético $\vec{B}$ na direção do eixo z , as energias e funções de onda, na aproximação da massa efetiva, serão soluções da equação de Schrödinger efetiva:

$$\left[\nabla_{\rho_1}^2 + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + \nabla_{\rho_2}^2 + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} + \frac{2Z}{\epsilon \sqrt{\rho_1^2 + z_1^2}} + \frac{2Z}{\epsilon \sqrt{\rho_2^2 + z_2^2}} - \frac{2}{\epsilon \sqrt{(\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}} - V_c(z_1) - V_c(z_2) - \gamma (\hat{L}_{z_1} + \hat{L}_{z_2}) - \frac{\gamma^2}{4} (\rho_1^2 + \rho_2^2) + 2E \right] \Psi(\rho_1, \rho_2, \theta_1, \theta_2, z_1, z_2), \quad (\text{III.1})$$

com $\hat{L}_{z_i} = -i\partial/\partial\theta_i$, $i = 1, 2$, o operador de momento angular azimutal de um elétron, em unidades de $\hbar$. O potencial $V_c(z_i)$ devido ao confinamento pelo poço, é dado por:

$$V_c(z_i) = \begin{cases} 0, & \text{para } -L/2 < z_i < L/2 \\ \infty, & \text{para } |z_i| > L/2 \end{cases},$$

Devido ao potencial de Coulomb, a (Eq. III.1) não é separável. Na ausência da interação de Coulomb, ela pode ser escrita como:

$$\left[\nabla_{\rho_1}^2 + \nabla_{\rho_2}^2 - \frac{\gamma^2}{4} (\rho_1^2 + \rho_2^2) + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - V_c(z_1) - V_c(z_2) + 2E_B \right] \psi(\rho_1, \rho_2, z_1, z_2) = 0,$$

onde $E_B = E - \gamma M/2$, com $M = m_1 + m_2$ o número quântico azimutal total. A equação anterior é separável nas coordenadas (ρ_1, ρ_2) e (z_1, z_2) . Suas soluções podem ser escritas como:

$$\psi(\rho_1, \rho_2, z_1, z_2) = \Phi_N(\rho_1, \rho_2) \chi_n(z_1, z_2), \quad (\text{III.2})$$

onde $\Phi_N(\rho_1, \rho_2)$ é a solução da equação de Schrödinger para o oscilador harmônico bidimensional (estados de Landau) e $\chi_n(z_1, z_2)$ são os autoestados do poço de potencial.

Desde que as autofunções χ_n formam uma base completa, a função de onda total pode ser expandida nessa base:

$$\Psi(\rho_1, \rho_2, \theta_1, \theta_2, z_1, z_2) = \sum_n \Phi_n(\rho_1, \rho_2, \theta_1, \theta_2) \chi_n(z_1, z_2). \quad (\text{III.3})$$

O potencial de Coulomb acopla um estado n do poço com todos os outros. Considerando-se que o espaçamento entre os níveis de energia do poço é bem maior que a energia de ligação do sistema (a separação entre os dois primeiros níveis do poço é da ordem de 200 meV , para largura de poço $L = 100 \text{ Å}$ no $GaAs$, enquanto que a energia de ligação é da ordem de 3 meV), os acoplamentos são desprezíveis e a função de onda do sistema é separável. O primeiro nível do poço tem energia $E_1 = 56 \text{ meV}$, bem maior que a energia de ligação e, assim, a função de onda em z corresponderá ao primeiro autoestado do poço:

$$\chi_1(z_1, z_2) = \varphi_1(z_1) \varphi_1(z_2) = (2/L) \cos(\pi z_1/L) \cos(\pi z_2/L). \quad (\text{III.4})$$

Substituindo a expansão (Eq. III.3) na equação (Eq. III.1), considerando a (Eq. III.4) e integrando nas variáveis z_1 e z_2 , obtém-se a equação de Schrödinger bidimensional para os potenciais efetivos:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho_2^2} + \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial}{\partial \rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \frac{\partial}{\partial \rho_2} + \frac{L_{z1}^2}{\rho_1^2} + \frac{L_{z2}^2}{\rho_2^2} + V_{eff}(\rho_1) + V_{eff}(\rho_2) - \right. \\ \left. - V_{eff}(\rho_1, \rho_2, \theta_1, \theta_2) - \gamma (\hat{L}_{z1} + \hat{L}_{z2}) - \frac{\gamma^2}{4} (\rho_1^2 + \rho_2^2) + 2\varepsilon \right] \psi(\rho_1, \rho_2, \theta_1, \theta_2) = 0, \quad (III.5)$$

onde $\varepsilon = E - 2E_1$. Os potenciais efetivos são dados por:

$$V_{eff}(\rho_1) = (2/L) \int_{-L/2}^{L/2} dz_1 \frac{2\cos^2(\pi z_1/L)}{\epsilon \sqrt{\rho_1^2 + z_1^2}}, \quad (III.6)$$

$$V_{eff}(\rho_2) = (2/L) \int_{-L/2}^{L/2} dz_2 \frac{2\cos^2(\pi z_2/L)}{\epsilon \sqrt{\rho_2^2 + z_2^2}} \quad (III.7)$$

e

$$V_{eff}(\rho_1, \rho_2, \theta_1, \theta_2) = (2/L)^2 \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} dz_1 dz_2 \frac{2\cos^2(\pi z_1/L) \cos^2(\pi z_2/L)}{\epsilon \sqrt{(\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}}. \quad (III.8)$$

Para $\rho_1, \rho_2 \gg z_1, z_2$, estes potenciais são reduzidos a potenciais estritamente $2D$.

A (Eq. III.5) é a equação de Schrödinger para o íon D^- em um poço de potencial, na presença de um campo magnético externo. Esta equação é similar à equação do movimento estritamente bidimensional, mas com potenciais efetivos.