



UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Carlos Magno Oliveira Pereira

**Seção de choque de fotoionização para anel
quântico 2D com e sem efeitos de rotação**

São Luís - MA, Brasil

Março de 2024

Carlos Magno Oliveira Pereira

**Seção de choque de fotoionização para anel quântico 2D
com e sem efeitos de rotação**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Maranhão como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Universidade Federal do Maranhão - UFMA

Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Edilberto Oliveira Silva

São Luís - MA, Brasil

Março de 2024

Ficha gerada por meio do SIGAA/Biblioteca com dados fornecidos pelo(a) autor(a).
Diretoria Integrada de Bibliotecas/UFMA

Oliveira Pereira, Carlos Magno.

Seção de choque de fotoionização para anel quântico 2D
com e sem efeitos de rotação / Carlos Magno Oliveira
Pereira. - 2024.

78 f.

Orientador(a): Edilberto Oliveira Silva.

Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-graduação em
Física/ccet, Universidade Federal do Maranhão, São Luís,
2024.

1. Anel quântico. 2. Efeito rotativo. 3. Seção de
choque de fotoionização. I. Oliveira Silva, Edilberto.
II. Título.

Carlos Magno Oliveira Pereira

Seção de choque de fotoionização para anel quântico 2D com e sem efeitos de rotação

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Maranhão como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

São Luís - MA, Brasil, Março de 2024:

Prof. Dr. Edilberto Oliveira Silva
(UFMA)

Prof. Dr. Diego Paiva Pires
(UFMA)

Prof. Dr. Cleverson Filgueiras
(UFLA)

Dedico à minha mãe e a toda a minha família.

Agradecimentos

- Agradeço a Doraci Oliveira, minha mãe, por todo suporte e apoio oferecidos ao longo da minha trajetória na física;
- Ao meu orientador e amigo, Edilberto, por ser sempre solícito nos meus momentos de dúvida, assim como pela sua influência e contribuição em minha formação acadêmica;
- A todos os outros membros da minha família que sempre me deram todo carinho, incentivo e contribuições positivas para meu futuro na carreira acadêmica.
- A todos os professores que, de alguma forma, contribuíram para a minha formação acadêmica;
- À Capes, pela contribuição financeira concedido durante todo o curso de Mestrado;
- À Universidade Federal do Maranhão, pelo espaço cedido e pela oportunidade oferecida.

“A matemática é o alfabeto no qual Deus escreveu o universo.”

(Galileu Galilei)

Resumo

Neste estudo, investigamos as propriedades eletrônicas e ópticas de uma heteroestrutura mesoscópica de um anel quântico bidimensional composto pelo semiconductor arsenieto de gálio (GaAs). Utilizando o potencial de confinamento proposto por Tan-Inkson para descrever o sistema em análise, realizamos um estudo numérico da seção de choque de fotoionização (SCF) para um anel quântico 2D com e sem efeitos de rotação. O interior do anel quântico é atravessado por um fluxo de Aharonov-Bohm (AB). Nossa pesquisa se destina a investigar como as propriedades eletrônicas e ópticas dessa estrutura mesoscópica respondem às variações nos seguintes parâmetros: raio médio, fluxo de Aharonov-Bohm, velocidade angular e energia do fóton incidente. Sob essas condições, estabelecemos que as transições ópticas ocorrem do estado fundamental para o próximo estado excitado na sub-banda de condução, seguindo uma regra de seleção específica. Um dos objetivos fundamentais deste estudo consiste em analisar como essas regras podem influenciar as propriedades gerais dos anéis quânticos bidimensionais. Para elucidar o impacto da rotação no processo de fotoionização do sistema, apresentamos resultados que evidenciam os efeitos das grandezas físicas envolvidas no modelo.

Palavras-chave: seção de choque de fotoionização, efeito rotativo, anel quântico.

Abstract

In this study, we investigated the electronic and optical properties of a mesoscopic heterostructure of a two-dimensional quantum ring composed of gallium arsenide (GaAs) semiconductor. Using the confinement potential proposed by Tan-Inkson to describe the system under consideration, we conducted a numerical study of the photoionization cross-section (SCF) for a 2D quantum ring with and without rotation effects. The interior of the quantum ring is penetrated by an Aharonov-Bohm (AB) flux. Our research aims to investigate how the electronic and optical properties of this mesoscopic structure respond to variations in the following parameters: average radius, Aharonov-Bohm flux, angular velocity, and incident photon energy. Under these conditions, we established that optical transitions occur from the ground state to the next excited state in the conduction sub-band, following a specific selection rule. One of the fundamental objectives of this study is to analyze how these rules can influence the general properties of two-dimensional quantum rings. To elucidate the impact of rotation on the photoionization process of the system, we present results that highlight the effects of the physical quantities involved in the model.

Keywords: photoionization cross-section, rotating effect, quantum ring.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Níveis de energia dos átomos em interdependência atômica.	15
Figura 2 – Esquema das bandas de valência e de condução de materiais semicondutores, isolantes e condutores.	16
Figura 3 – Anel quântico por imagem de microscopia de força atômica (AFM). . .	18
Figura 4 – Esquematização de um elétron viajando na região exterior de um solenoide carregado.	25
Figura 5 – Esquematização do experimento para detecção do efeito Aharonov-Bohm.	28
Figura 6 – Gráfico do potencial de Tan-Inkson (Eq. (2.47)) e do potencial na aproximação harmônica (Eq. (2.51)).	32
Figura 7 – Gráfico tridimensional do potencial de Tan-Inkson (Eq. (2.47)). . . .	33
Figura 8 – Gráfico da distribuição de probabilidade para os três primeiros números quânticos n	36
Figura 9 – Densidade de probabilidade normalizada no plano xy para alguns valores de n e m	37
Figura 10 – Gráfico das Sub-bandas como Função do Número Quântico m	38
Figura 11 – Gráfico das Sub-bandas como Função do Campo magnético.	39
Figura 12 – Gráfico das Sub-bandas como Função do fluxo magnético.	40
Figura 13 – Ilustração das Oscilações Aharonov-Bohm	40
Figura 14 – Gráfico da seção de choque de fotoionização em função do fluxo	42
Figura 15 – Gráfico da seção de choque de fotoionização em função da energia do fóton incidente para diferentes valores de fluxo	44
Figura 16 – Gráfico da seção de choque de fotoionização em função de ϕ	44
Figura 17 – Ilustração de um elétron em um referencial girando com velocidade angular Ω em torno de $\hat{z}$	46
Figura 18 – Função de distribuição de probabilidade para rotações positivas.	51
Figura 19 – Função de distribuição de probabilidade para rotações negativas.	51
Figura 20 – Função de distribuição de probabilidade para diferentes rotações	52
Figura 21 – Função de distribuição de probabilidade para diferentes rotações negativas	53
Figura 22 – Gráfico da Energia em Função da Velocidade Angular para as três sub-bandas mais baixas.	54
Figura 23 – Gráfico da Energia em Função do Campo Magnético.	55
Figura 24 – Gráfico da SCF em função da energia do fóton para diferentes valores de raio médio.	57
Figura 25 – Gráfico SCF em função da energia do fóton para diferentes valores de velocidade angular.	58

Figura 26 – Gráfico SCF em função da energia da velocidade angular para diferentes valores de energia do fóton incidente.	58
--	----

Lista de tabelas

Tabela 1 – Uma parte da tabela periódica para alguns semicondutores.	17
Tabela 2 – Lista de alguns compostos semicondutores.	18

Sumário

1	INTRODUÇÃO	14
I	PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E ÓPTICAS DE ANÉIS QUÂNTICOS 2D	21
2	MODELO DE ANEL QUÂNTICO 2D	22
2.1	Níveis de Landau	22
2.2	Efeito Aharonov-Bohm	24
2.3	O modelo de Tan-Inkson	30
2.4	Análise dos níveis de energia em anéis quânticos	38
3	SEÇÃO DE CHOQUE DE FOTOIONIZAÇÃO PARA O MODELO DE ANEL QUÂNTICO 2D	41
II	PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E ÓPTICAS DE ANÉIS QUÂNTICOS 2D SOB EFEITOS DE ROTAÇÃO	45
4	MODELO DE ANEL QUÂNTICO 2D SOB EFEITO DE ROTAÇÃO	46
4.1	Descrição do modelo de anel quântico 2D sob efeitos de rotação . .	46
4.2	Potencial de Confinamento de Tan-Inkson em anel quântico sob efeitos de rotação	47
4.3	Análise dos níveis de energia em anéis quânticos sob efeitos de rotação	53
5	SEÇÃO DE CHOQUE DE FOTOIONIZAÇÃO NO MODELO DE ANEL QUÂNTICO 2D SOB EFEITO DE ROTAÇÃO	56
6	CONCLUSÕES	60
	REFERÊNCIAS	62
	APÊNDICES	70
	APÊNDICE A – REGRA DE SELEÇÃO	71
	APÊNDICE B – PARTÍCULA EM UM CAMPO MAGNÉTICO . .	73

APÊNDICE C – CÁLCULO DA NORMALIZAÇÃO DA FUNÇÃO DE ONDA	75
APÊNDICE D – ARTIGO RELACIONADO À DISSERTAÇÃO . . .	78

1 INTRODUÇÃO

Com o avanço e o rápido aprimoramento da tecnologia de nanoestruturas, as propriedades eletrônicas e ópticas relacionadas a semicondutores de baixa dimensionalidade têm atraído grande interesse dos pesquisadores no campo da física mesoscópica, área dedicada à investigação de sistemas quânticos em uma escala intermediária, caracterizada por dimensões superiores à escala atômica, mas que ainda se situam abaixo dos limites observados em objetos macroscópicos. Tais sistemas têm dimensões da ordem de nanômetros (10^{-9} m) [1], sendo objeto de extensiva investigação não apenas por sua relevância científica, mas também devido à sua ampla aplicabilidade tecnológica como em dispositivos optoeletrônicos, formando-se um grande interesse tanto em seu estudo teórico quanto experimental.

Deste modo, algumas das propriedades eletrônicas e ópticas vem sendo exploradas no contexto de confinamento quântico, como poços quânticos (QWs) [2–4], pontos quânticos (QDs) [5–8], anéis quânticos (QRs) [9–11], dentre outras estruturas mesoscópicas [12] (sistemas de dimensões na ordem de nanômetros). Estas estruturas são geralmente compostas por duas ou mais camadas de diferentes tipos de semicondutores justapostos, conhecidos como heteroestruturas, onde há um confinamento dos portadores de carga [13]. Em 2023, os pesquisadores Mounqi Gabriel Bawendi, Louis Brus e Alexei Ekimov ganharam o Prêmio Nobel de Química concedido pela descoberta e síntese dos QDs [14], caracterizado pelo confinamento nas três direções espaciais para os elétrons, este fenômeno implica na completa localização dos portadores de carga, assemelhando-se ao comportamento observado em átomos [1]. Esse arranjo resulta na manifestação de níveis de energia discretos [7, 15], motivo pelo qual são comumente referidos como átomos artificiais na literatura [16–19]. Quando as partículas atingem tamanhos de apenas alguns nanômetros, o espaço para os elétrons diminui, levando a efeitos significativos nas propriedades ópticas e eletrônicas.

Os QDs e QRs são fabricados a partir de heteroestruturas semicondutoras, essenciais no desenvolvimento de nanotecnologia, principalmente na fabricação de chips, itens indispensáveis presentes em celulares, computadores e até em carros. Também está presente nas cores que iluminam dispositivos como televisores, lâmpadas LEDs (*Light Emitting Diode*) e outros dispositivos eletrônicos e ópticos, além de guiar cirurgias de remoção de tecido tumoral. Mais detalhes sobre essas e outras aplicações podem ser explorados com uma pesquisa rápida nas Refs. [20–22].

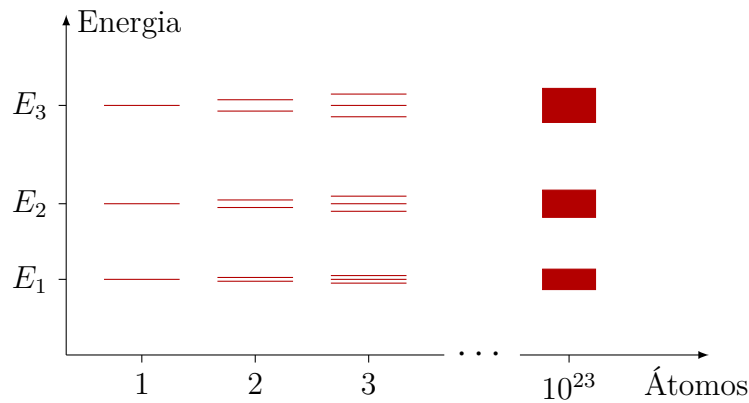
Os semicondutores são um grupo de materiais com condutividade elétrica intermediária entre a dos metais e dos isolantes, descrito pela teoria das bandas. A condutividade dos semicondutores pode ser ajustada, permitindo a passagem de corrente elétrica em um

circuito atuando como metais ou a impedindo atuando como isolantes [23]. A modificação da condutividade dos semicondutores pode ser realizada por meio de diversas estratégias, abrangendo, entre elas, a variação da temperatura.

Segundo a Ref. [23], os semicondutores são classificados em duas categorias gerais: materiais semicondutores elementares, encontrados no grupo IV da tabela periódica; materiais semicondutores compostos, a maioria dos quais são formados partir de combinações especiais de elementos do grupo III e do grupo V.

Como nos sólidos, os átomos estão muito próximos uns dos outros, com a separação interatômica aproximadamente igual ao tamanho dos átomos, surge uma interação iminente a esse fator. Em um átomo isolado, o elétron possui alguns valores de energia permitidos que podem ser ocupados. À medida que o número de átomos aumenta, os orbitais externos sobrepõem-se e interagem de maneira significativa entre si. Consequentemente, isso amplia os níveis discretos dos átomos livres em bandas, conforme representado esquematicamente na Fig. 1.

Figura 1 – Níveis de energia dos átomos em interdependência atômica.



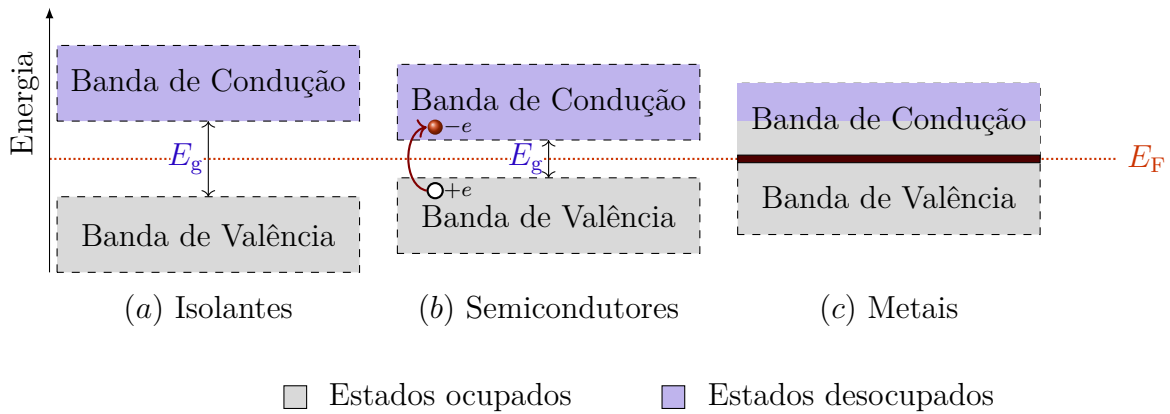
Fonte: Adaptada da Ref. [24].

A última faixa eletrônica completamente preenchida é denominada banda de valência, enquanto a primeira faixa seguinte é denominada como banda de condução, a qual pode estar totalmente desocupada ou parcialmente preenchida. A diferença entre o valor mínimo da banda de condução e o valor máximo da banda de valência é conhecida como gap, no qual não existem estados de energia permitidos. Este intervalo proibido é representado como E_g .

A Fig. 2 apresenta um diagrama genérico do nível de energia para (a) isolantes, (b) semicondutores e (c) condutores. Os isolantes são materiais que possuem a última banda completamente preenchida. A aplicação de um campo elétrico externo não altera o momento total dos elétrons (que é nulo), uma vez que todos os estados estão ocupados. Portanto, não ocorre corrente elétrica. O nível de energia acima do qual não existem estados ocupados à temperatura de $T = 0$ K é designado como nível de Fermi (E_F) [25].

Os materiais condutores, também chamados de metais, exibem uma elevada condutividade elétrica e térmica, mantendo a capacidade de conduzir corrente elétrica mesmo à temperatura absoluta ($T = 0$ K). A Fig. 2 ilustra uma representação esquemática dos metais, evidenciando a condição em que a última banda de valência se encontra parcialmente preenchida. Ao aplicar um campo elétrico nesses materiais, os portadores de carga movem-se praticamente de maneira livre. A notável condutividade dos metais pode ser explicada pela ausência da região proibida. Essas características dos metais são estrategicamente exploradas e aplicadas na condução de corrente elétrica, sobretudo nas infraestruturas do setor de energia elétrica.

Figura 2 – Esquema das bandas de valência e de condução de materiais semicondutores, isolantes e condutores.



Para semicondutores, temos que na temperatura zero absoluto ($T = 0$ K) os elétrons preenchem completamente todas as bandas de energias, começando pela mais baixa, até a banda de valência. À medida que a temperatura aumenta, um certo número de elétrons pode ser excitado e ganha energia suficiente, podendo saltar da banda de valência para a banda de condução, contribuindo para a condutividade do material. Neste processo, os elétrons deixam os estados vazios, chamados buracos na banda de valência. Esses estados vazios são equivalentes à ausência de um elétron e se comportam como partículas com carga positiva ($+e$) [27].

O estudo das propriedades elétricas das heteroestruturas semicondutoras exige a compreensão do comportamento dos portadores de carga sob a influência de um campo elétrico. Elétrons na banda de condução e buracos na banda de valência exibem um comportamento similar a partículas livres, mas com uma massa efetiva (μ) diferente da massa do elétron no vácuo (m_e). Essa massa modificada depende do material e pode ser distinta para elétrons e buracos. A corrente elétrica em semicondutores pode ser transportada por ambos: elétrons na banda de condução e buracos na banda de valência [27].

Tabela 1 – Uma parte da tabela periódica para alguns semicondutores.

III	IV	V
⁵ B	⁶ C	
¹³ Al	¹⁴ Si	¹⁵ P
³¹ Ga	³² Ge	³³ As
⁴⁹ In		⁵¹ Sb

Fonte: Adaptada de [23].

A massa efetiva é definida pela forma tensorial [25, 28]:

$$\mu_{i,j} = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_i \partial k_j}, \quad (1.1)$$

onde E e $\mathbf{k}$ são a energia e o vetor de onda, respectivamente. A relação entre ambos não é isotrópica, pois a massa efetiva leva em conta a dependência da direção de $\mathbf{k}$. Isso ressalta que, na definição mais geral, a massa efetiva não é um escalar, mas sim uma grandeza tensorial representada por uma matriz com os elementos i e j . Consideraremos o caso mais simples para a aproximação da massa efetiva onde $\mu = \hbar^2 / (\partial^2 E / \partial k^2)$.

Para o elétron livre, a energia é dada pela relação de dispersão $E = p^2 / 2m_e = \hbar^2 k^2 / 2m_e$. Neste caso, é a mesma em todas as direções, ou seja, é isotrópica, a massa efetiva é igual à própria massa do elétron livre ($\mu = m_e$). A definição de massa efetiva vale para elétrons em metais ou em semicondutores [25, 28].

A Tabela 1 mostra uma parte da tabela periódica na qual os semicondutores mais comuns são encontrados e a Tabela 2 lista alguns dos materiais semicondutores elementares e compostos. Os materiais elementares, aqueles compostos de uma única espécie de átomos, são o silício e o germânio. O arsênio (As), gálio (Ga) e índio (In) de grande interesse tanto teórico quanto experimental na indústria eletrônica de nanotecnologia e da informação quântica [29], conseguem produzir compostos binários, como arsenieto de gálio (GaAs), arsenieto de índio (InAs) ou ligas ternárias como arsenieto de gálio-índio (InGaAs). A substância de análise neste estudo será o arsenieto de gálio (GaAs), reconhecido por sua notável mobilidade eletrônica e suas aplicações em dispositivos eletrônicos e no âmbito da nanotecnologia [30].

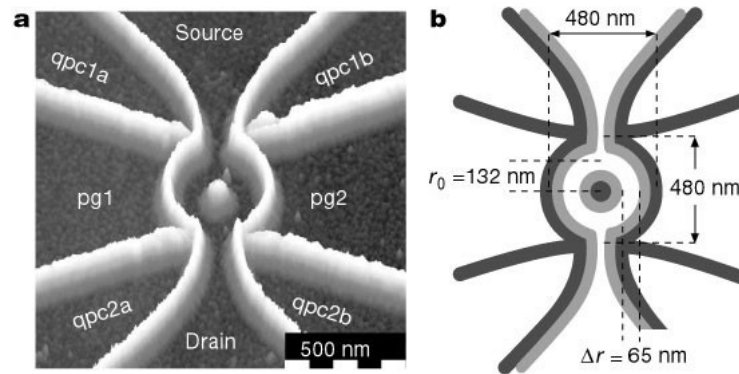
Na Fig. 3, observa-se uma representação visual de um anel quântico, cujo raio médio é $r_0 = 132$ nm fabricado sobre uma heteroestrutura AlGaAs/GaAs (arsenieto de gálio-alumínio/arsenieto de gálio), contendo um gás de elétrons [31]. A imagem à esquerda foi obtida por um microscópio de força atômica (AFM) que capturou a morfologia de anéis quânticos, crescidos por eletrodeposição. As regiões brilhantes correspondem às linhas de óxido que separam a amostra em várias regiões condutoras (representadas em tons escuros). A figura à direita é um esboço esquemático, exibindo as dimensões do anel quântico. Nesta dissertação, utilizaremos um modelo de anel quântico similar, no qual o seu interior é

Tabela 2 – Lista de alguns compostos semicondutores.

Semicondutores elementares	
Si	Silício
Ge	Germânio
Semicondutores compostos	
AlP	Fosfeto de alumínio
AlAs	Arsenieto de alumínio
GaP	Fosfeto de gálio
GaAs	Arsenieto de gálio
InP	Fosfeto de índio

Fonte: Adaptada de [23].

Figura 3 – Anel quântico por imagem de microscopia de força atômica (AFM).



Fonte: Retiradas da Ref. [31].

percorrido por um fluxo de Aharonov-Bohm.

Os anéis quânticos são ótimas estruturas topológicas que apresentam fenômenos quânticos importantes a serem investigados. Entre esses fenômenos, destaca-se, por exemplo, a manifestação do efeito Aharonov-Bohm [32–34], correntes persistentes [35,36], interferência quântica [37], níveis de Landau [38] e, igualmente relevante, os efeitos induzidos pela rotação [9,39]. Consequentemente, é de grande interesse científico, tanto o estudo experimental [40] quanto teórico [41]. Neste trabalho, em particular, investigaremos a seção de choque de fotoionização para anéis quânticos com e sem efeitos de rotação. Também daremos ênfase aos efeitos provocados pela variação do campo magnético, do fluxo de Aharonov-Bohm, do raio médio do anel e da velocidade angular.

O efeito Aharonov-Bohm [42] é fenômeno quântico que demonstra a alteração no padrão das franjas de interferência no experimento de dupla fenda. Este efeito é ocasionado pela presença de um solenóide entre os feixes de elétrons no experimento de dupla fenda, proposto em 1959 pelos físicos Yakir Aharonov e David Bohm [43]. Detalhes adicionais sobre este fenômeno serão discutidos no Capítulo 2. Tal efeito apresenta amplas aplicações em diversas áreas da física, como informação e computação quântica [44–46],

além de ter relevância na relatividade geral. Por exemplo, a Ref. [47] demonstra como a gravidade induz mudanças de fase análogas às produzidas por interações eletromagnéticas, sendo denominado na literatura como “efeito Aharonov-Bohm gravitacional” [48]. O efeito Aharonov-Bohm também desperta grande interesse na física mesoscópica, sendo objeto de numerosos estudos e pesquisas em anéis quânticos semicondutores, como, por exemplo, explorando o efeito em anéis duplos quânticos concêntricos [49] ou na investigação das propriedades ópticas dos semicondutores [50].

Os anéis quânticos representam nanoestruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade, constituindo objetos de estudo em diversas áreas da física. Estas estruturas têm extensivas aplicações práticas, destacando-se como fontes de laser (*Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*) [51, 52] utilizadas em setores como telecomunicações, armazenamento de dados e medicina. Adicionalmente, esses anéis quânticos encontram aplicabilidade na computação quântica [44], spintrônica [53], optoeletrônica [54] e emissão de fóton único [55].

Um estudo publicado pela Ref. [56] aborda a viabilidade da produção de um novo fotodetector baseado na estrutura de anéis quânticos em formato de flocos de neve. Os resultados obtidos nessa pesquisa são aplicáveis para um experimentalista que deseje projetar um fotodetector, sendo relevante em aplicações como visão noturna, detecção térmica e absorção total de infravermelho.

A diminuição da dimensionalidade em estruturas mesoscópicas semicondutoras, onde os elétrons encontram-se confinados, afeta significativamente as propriedades eletrônicas e ópticas. Este fenômeno tem impulsionado pesquisas nessas estruturas de confinamento, sendo uma das propriedades de interesse a seção de choque de fotoionização (SCF), a qual desempenha um papel importante na caracterização de impurezas em semicondutores [57], com sua formulação proposta por Lax [58]. Desde então, novos estudos têm surgido para distintas estruturas e aplicações, como poços quânticos [59–61], pontos quânticos [6, 62], anéis quânticos [10, 11, 63]. Os estudos da fotoionização podem oferecer informações sobre a interação da radiação com a matéria em variadas condições. Os estudos a essas estruturas incluem comportamento da SCF sob a influência dos campos elétricos e magnéticos aplicados, variações de pressão hidrostática e temperatura.

O presente estudo fundamenta-se no trabalho de Xie [63] sobre a seção de choque de fotoionização (SCF) de um anel quântico sem impurezas, considerando a influência de um campo magnético e do fluxo de Aharonov-Bohm. Nossa contribuição consiste em uma análise concisa dos efeitos gerados pela rotação sobre os perfis da SCF. O resultado deste trabalho encontra-se documentado em um artigo disponível para consulta no repositório do arXiv [64].

Esta dissertação está organizada da seguinte forma:

- No Capítulo 2, faremos uma breve revisão sobre o efeito Aharonov-Bohm (AB) e o modelo de confinamento de Tan-Inkson para um QR 2D. Escreveremos a equação de Schrödinger que descreve o sistema e determinaremos as funções de onda e energias. Em seguida, realizaremos um estudo das autofunções e dos autovalores de energia com o intuito de verificar como as propriedades eletrônicas se comportam quando variamos os parâmetros do sistema, como o campo magnético e o fluxo de Aharonov-Bohm.
- No Capítulo 3, apresentaremos a fórmula para o cálculo da seção de choque de fotoionização (SCF) e sua importância na física. O objetivo é determinar a expressão para o cálculo da SCF para o modelo de Tan-Inkson. Subsequentemente, discutiremos os efeitos causados na SCF quando variamos os parâmetros de fluxo de AB e o raio médio do anel. Também mostraremos, em particular, as implicações físicas sobre o perfil dos autovalores de energia devido a essas variações nos parâmetros do sistema, e que isso provoca desvios nos picos ressonantes da SCF.
- No Capítulo 4, estudaremos o modelo de Tan-Inkson descrito no capítulo Capítulo 3 incluindo efeitos da rotação. Escrevemos a equação de Schrödinger que descreve o sistema e determinamos as autofunções e autovalores de energia da partícula. Finalizamos este capítulo estudando os efeitos da rotação sobre as energias e funções de onda.
- No Capítulo 5, apresentaremos a segunda parte da contribuição original do nosso trabalho. Estudaremos o modelo de Tan-Inkson com rotação e calcularemos a seção de choque de fotoionização. Analisaremos as implicações físicas devido à presença da rotação sobre a SCF. Apresentaremos uma discussão sobre o resultado e esboço de gráficos da SCF como uma função da energia de transição entre níveis para diferentes valores do parâmetro de fluxo AB.
- Nossas conclusões e perspectivas serão apresentadas no Capítulo 6.

Parte I

Propriedades eletrônicas e ópticas de anéis quânticos 2D

2 MODELO DE ANEL QUÂNTICO 2D

Neste capítulo, estudamos o modelo de um anel quântico bidimensional descrito pelo potencial de confinamento de Tan e Inkson. Este modelo é bem conhecido por ser flexível e exatamente solúvel para semicondutores bidimensionais. A flexibilidade do modelo confere-se na possibilidade de ajustar determinados parâmetros do potencial, permitindo-nos assim descrever o potencial de confinamento em outras estruturas mesoscópicas, incluindo, por exemplo, mas não se limitando a, pontos e fios quânticos.

2.1 Níveis de Landau

Uma abordagem bastante simplificada para confinar uma partícula carregada a uma região do espaço é submetê-la a um campo magnético. Em cenários mais elementares, estudamos o movimento dos portadores de carga na presença desse campo magnético, o qual, diferentemente dos campos elétricos, não influencia a energia do elétron, pois a força é perpendicular à direção do movimento [65]. Aplicando a segunda lei de Newton

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}, \quad (2.1)$$

com

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad (2.2)$$

sendo o momento do elétron, a equação de movimento é escrita como

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (2.3)$$

onde e é a carga, $\mathbf{B}$ é o vetor do campo magnético e $\mathbf{v}$ é a velocidade do portador. Considerando o campo magnético uniforme na direção $\mathbf{z}$, escrevemos

$$\frac{dk_z}{dt} = e(v_x B_y - v_y B_x) = 0, \quad (2.4)$$

com k_z sendo uma constante de movimento. Deste modo, obtemos as equações

$$\hbar \frac{dk_x}{dt} = ev_y B, \quad (2.5)$$

$$\hbar \frac{dk_y}{dt} = -ev_x B. \quad (2.6)$$

Pode ser verificado que, considerando $v_x = \hbar^{-1} dE/dk_x$ e $v_y = \hbar^{-1} dE/dk_y$, sendo E a energia da partícula, a Eq. (2.5) é equivalente a

$$\hbar^2 \frac{dk_x}{dt} \frac{dk_y}{dE} = eB. \quad (2.7)$$

A quantidade $dk_x dk_y$ é interpretada como sendo o elemento de área infinitesimal da órbita eletrônica no plano perpendicular a $\mathbf{B}$. Após um período T , a órbita será fechada, e sua área é dada por ds . A integração em relação a t ao longo de uma direção específica de k dentro dos limites de um período da Eq. (2.7) fornece

$$\hbar^2 \frac{ds}{dE} = eBT = eB \frac{2\pi}{\omega_c}, \quad (2.8)$$

e

$$\omega_c = \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \frac{dE}{ds}, \quad (2.9)$$

onde ω_c é conhecido como frequência ciclotrônica. Este último (Eq. (2.9)) carrega informações sobre a taxa na qual as superfícies de energia variam com $\mathbf{k}$ através da quantidade dE/ds . Para uma banda parabólica simples, com energia $E = \hbar^2 k^2 / 2m_e$, onde m_e é a massa da partícula e $s = \pi k^2$, escrevemos $dE/ds = \hbar^2 / 2\pi m_e$, o que resulta em $\omega_c = eB/m_e$. Por analogia com uma partícula no espaço livre, um portador de carga em um semiconductor com massa efetiva μ^1 tem uma frequência ciclotrônica

$$\omega_c = \frac{eB}{\mu}. \quad (2.10)$$

A medição desta frequência é, portanto, uma medição indireta da massa efetiva [65].

Consideramos a influência de um campo magnético externo sobre o sistema, a dinâmica é conduzida através do acoplamento mínimo, onde o potencial vetor é introduzido na equação de Schrödinger. O Apêndice B mostra a dinâmica de uma partícula submetida a um campo magnético uniforme, com o momento da partícula tendo uma contribuição através do potencial vetor $\mathbf{A}$. A partir dos resultados acima, podemos fazer a escolha de calibre, de tal modo que o potencial em relação ao campo magnético não-nulo ao longo do eixo de interesse é escolhido como [66]:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ 0 & 0 & B \\ x & y & z \end{vmatrix} = \frac{1}{2}(-By, Bx, 0). \quad (2.11)$$

O potencial vetor na Eq. (2.11) é conhecido como “calibre simétrico”, um caso particular de calibre de Coulomb, com $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ e $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$. Conforme a Ref. [67], a resolução de questões de natureza quântica requer a escolha de um calibre para o vetor potencial do campo magnético. Dentre os calibres existentes, tais como o de Landau, destaca-se o calibre simétrico. Este se revela crucial na elaboração das funções de onda dos elétrons, ao preservar a invariância rotacional. Por esta razão, optamos pela utilização do calibre simétrico, uma escolha fundamentada na preservação do campo ao longo do eixo z neste contexto em específico. É bem conhecido que outras escolhas também são possíveis como,

¹ A descrição da massa efetiva foi previamente abordada na introdução da dissertação.

por exemplo, $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ ou $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$, as quais preservam o campo B ao longo dos eixos x e y , respectivamente.

Sabemos que, nessa situação, o momento total $\mathbf{p}$ não é apenas o momento linear $\mu d\mathbf{x}/dt$, mas contém uma contribuição do potencial vetor: $\mathbf{p} = \mu d\mathbf{x}/dt + e\mathbf{A}$ [68]. A partir do Hamiltoniano apresentada no Apêndice B, é possível empregar um procedimento seguro mediante a expressão:

$$\frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2\mu} = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e}{2\mu}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{e^2}{2\mu}\mathbf{A}^2, \quad (2.12)$$

no contexto da mecânica quântica, é importante destacar que o potencial $\mathbf{A}$ (bem como V) pode ser interpretado como uma função do operador posição $\mathbf{x}$ da partícula carregada. Esta consideração implica que os operadores $\mathbf{A}$ e $\mathbf{p}$ não comutam. Nesta forma, o Hamiltoniano é hermitiano [68].

No calibre simétrico, o termo $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ pode ser escrito como

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{B}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \frac{1}{2}BL_z. \quad (2.13)$$

No contexto quântico, devemos partir da equação de Schrödinger, obtida a partir da equação de autovalor. No calibre que escolhemos, e levando em conta a frequência ciclotrônica (2.10), a equação de Schrödinger é escrita como

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + \frac{\mu\omega_c^2}{8}(x^2 + y^2)\psi - \frac{\omega_c}{2}L_z\psi = E\psi, \quad (2.14)$$

onde temos usado a expressão para o momento linear $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$. Os dois primeiros termos da Eq. (2.14) remetem ao oscilador harmônico com frequência $\omega_c/2$. Um deles depende apenas da coordenada x e o outro da coordenada y . Os autovalores de energia dessa equação são quantizados com $(n_x + 1/2)\hbar\omega_c/2$ e $(n_y + 1/2)\hbar\omega_c/2$, respectivamente, onde n_x e n_y são números inteiros quaisquer [66]. A expressão para a energia de Landau E_n pode ser escrita como:

$$E_n = (1/2 + n)\hbar\omega_c, \quad n = \frac{n_x + n_y}{2} = 1, 2, 3, \dots. \quad (2.15)$$

Para este sistema, por consequência da simetria de rotação (a força magnética é centrípeta e não exerce torque sobre a partícula), a componente vertical do momento angular é uma constante de movimento. Os níveis de energia quantizados de uma partícula carregada sujeita a um campo magnético intenso são comumente chamados de níveis de Landau [66].

2.2 Efeito Aharonov-Bohm

Um fenômeno de interferência quântica bastante interessante é o efeito Aharonov-Bohm. Conforme mencionado brevemente na introdução, este fenômeno foi desenvolvido

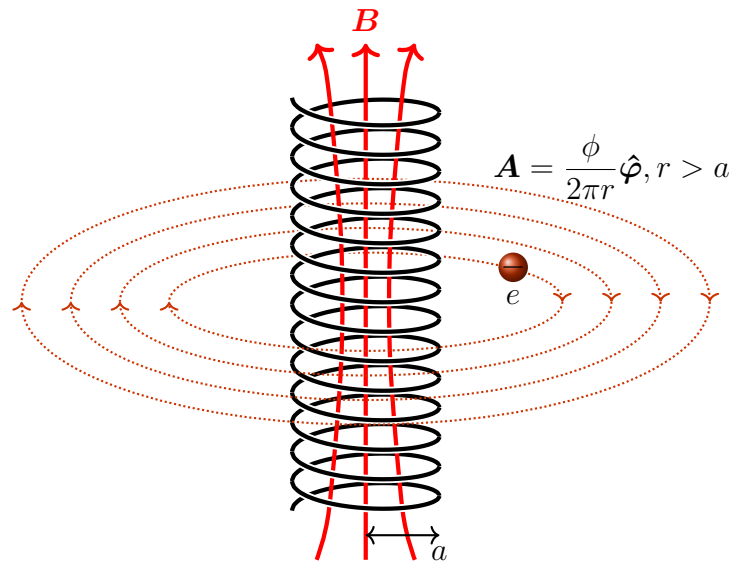
em 1959 por Yakir Aharonov e David Bohm, cujo trabalho foi publicado no artigo intitulado “Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory” [43]. No trabalho, os autores discutem sobre o significado dos potenciais vetor e escalar no eletromagnetismo clássico e quântico. Segundo eles, na eletrodinâmica clássica, os potenciais são tratados como ferramentas meramente matemáticas para calcular os campos elétricos e magnéticos, sendo estes, grandezas físicas invariantes perante uma transformação de calibre nas equações de Maxwell. Em outras palavras, o quadrivetor potencial A_μ sofre uma transformação do tipo $A_\mu \rightarrow A_\mu - \partial_\mu \xi$, chamadas de transformações de calibre, onde ξ é uma função arbitrária da posição e do tempo. Após a aplicação desta transformação, pode ser mostrado que o novo tensor de campo eletromagnético assume a forma usual encontrada na literatura

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu, \quad (2.16)$$

onde foi usado o teorema de Clairaut-Schwarz nos operadores diferenciais. Os índices ν e μ em (2.16) variam de 0 a 3, e representam as componentes matriciais para campos elétrico e magnéticos², $F_{\mu\nu}$ é fundamental na descrição matemática das equações de Maxwell. Este resultado mostra, de fato, que os campos permanecem inalterados após uma transformação de calibre, e que ξ não tem efeito sobre $F_{\mu\nu}$.

Em termos da física clássica, estamos analisando um elétron viajando ao redor de um solenoide de comprimento infinito e blindado (não há fuga de campo magnético) com raio a , conforme representado esquematicamente na Fig. 4. Existe campo magnético

Figura 4 – Esquematização de um elétron viajando na região exterior de um solenoide carregado.



Fonte: Elaborado pelo autor.

apenas dentro do solenoide. Fora dele, embora o campo magnético seja nulo, existe um

² Evite a confusão entre o índice μ e a massa efetiva, apesar de usarmos a mesma notação.

potencial vetor não nulo, o qual se relaciona com o campo magnético através das equações

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (2.17)$$

Dado que o campo magnético está orientado ao longo do eixo z , o potencial vetor circula na região externa, enquanto o elétron percorre as trajetórias definidas por este potencial (veja a Fig. 4). O campo magnético no interior do solenoide, percorrido por uma corrente elétrica i , é constante e uniforme ao longo da direção do seu eixo, sendo dado por

$$\mathbf{B} = n\mu_0 i \hat{\mathbf{z}}, \quad (2.18)$$

onde n é o número de espiras, e μ_0 é a permissividade magnética do meio. O fluxo magnético no solenoide é calculado como

$$\phi = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{s}, \quad (2.19)$$

onde $d\mathbf{s} = ds \hat{\mathbf{z}}$ é o elemento de área. Recorrendo ao teorema de Stokes, podemos determinar o fluxo de campo no solenoide

$$\phi = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{s} = \oint_c \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \oint_c \mathbf{A} \cdot r d\varphi \hat{\boldsymbol{\varphi}} = \int_0^{2\pi} A r d\varphi \hat{\boldsymbol{\varphi}} \cdot \hat{\boldsymbol{\varphi}} = A 2\pi r. \quad (2.20)$$

e, subsequentemente, o potencial vetor

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\phi}{2\pi r} \hat{\boldsymbol{\varphi}}. \quad (2.21)$$

Para a região interna e externa do solenoide o potencial vetor é expresso como:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2} \mu_0 n i r \hat{\boldsymbol{\varphi}}, \quad (r < a), \\ \mathbf{A}(\mathbf{r}) &= \frac{\mu_0 n i a^2}{2r} \hat{\boldsymbol{\varphi}}, \quad (r > a). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Na mecânica quântica, os potenciais assumem uma importância substancial, levando à expressão do Hamiltoniano escrito em termos de Φ e $\mathbf{A}$ em vez de $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$ [69]. Essa abordagem contrasta com a mecânica clássica, na qual os potenciais são meramente ferramentas matemáticas auxiliares, não desempenhando papel descritivo significativo. A região externa do solenoide é governada pela equação de Schrödinger com acoplamento mínimo $p^\tau \rightarrow p^\tau - eA^\tau$ com $(\tau = 0, 1, 2, 3)$, escrita na forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 + V \right] \psi. \quad (2.23)$$

Além do momento linear $\mathbf{p}$, a partícula tem um momento magnético $e\mathbf{A}$ devido a sua interação com o campo. A energia potencial contém a contribuição elétrica $V = e\Phi$ que, no presente caso, será considerada zero, haja vista que nossa análise se concentra exclusivamente no sistema sujeito à influência do campo magnético. Em capítulos específicos,

examinaremos de forma conjunta a influência exercida tanto pelo campo magnético quanto pela rotação. A equação de Schrödinger pode ser escrita por meio da substituição

$$\psi = e^{ig} \psi', \quad (2.24)$$

o termo de fase pode ser definido como [69]

$$g(\mathbf{r}) \equiv \frac{e}{\hbar} \int_{\mathcal{O}}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}', \quad (2.25)$$

onde $\mathcal{O}$ é um ponto de referencial arbitrário. Esta definição é válida somente quando $\nabla \times \mathbf{A} = 0$ em toda a região considerada. Em contrapartida, se esta condição não for atendida, a integral de linha tornar-se dependente da trajetória selecionada entre $\mathcal{O}$ e $\mathbf{r}$ e, portanto, não definiria uma função de $\mathbf{r}$ [69]. Vamos analisar o termo na equação de Schrödinger com o operador

$$\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \psi = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi - e\mathbf{A} \psi. \quad (2.26)$$

Com a substituição de (2.25), o gradiente da função de onda fornece

$$\nabla \psi = \exp(ig) (i \nabla g) \psi' + \exp(ig) (\nabla \psi'), \quad (2.27)$$

de modo que o operador (2.26) resulta

$$\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \psi = \frac{\hbar}{i} \exp(ig) [(i \nabla g) \psi' + (\nabla \psi')] - e \exp(ig) \mathbf{A} \psi'. \quad (2.28)$$

Aplicando o operador gradiente na Eq. (2.25), obtemos

$$\nabla g = \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}. \quad (2.29)$$

Substituindo o resultado anterior na Eq. (2.28), encontramos

$$\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \psi = \frac{\hbar}{i} \exp(ig) \left[\left(i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \psi' + (\nabla \psi') \right] - e \exp(ig) \mathbf{A} \psi' = \frac{\hbar}{i} \exp(ig) \nabla \psi'. \quad (2.30)$$

Todavia, o termo relevante para a equação de Schrödinger é

$$\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 \psi = \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \exp(ig) \nabla \psi' \right). \quad (2.31)$$

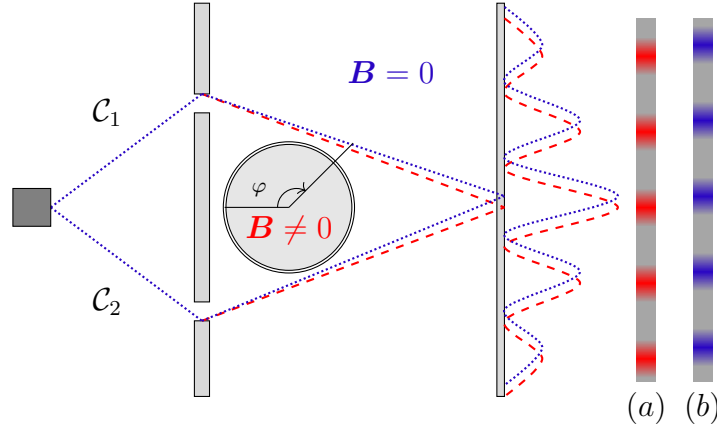
Deste modo, usando o resultado (2.30), a Eq. (2.31) resulta

$$\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 \psi = -\hbar^2 \nabla \cdot (e^{ig} \nabla \psi') + ie\hbar e^{ig} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi' = -\hbar^2 e^{ig} \nabla^2 \psi'. \quad (2.32)$$

Substituindo (2.32) na equação de Schrödinger Eq. (2.23), encontramos

$$i\hbar e^{ig} \frac{\partial \psi'}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \hbar^2 e^{ig} \nabla^2 \psi' + V e^{ig} \psi', \quad (2.33)$$

Figura 5 – Esquematização do experimento para detecção do efeito Aharonov-Bohm.



Na região interna do solenoide, o campo magnético é diferente de zero, enquanto na região externa ele é nulo. As linhas indicam os possíveis caminhos para o elétron, sendo as linhas pontilhadas de quando o solenoide está desligado e as tracejadas quando está ligado. As barras laterais (a) e (b) denotam os padrões de interferência para as duas configurações, respectivamente. Fonte: Elaborado pelo autor.

o qual resulta na equação de Schrödinger para ψ' sem termos envolvendo o potencial vetor $\mathbf{A}$, a saber

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \hbar^2 \nabla^2 \psi' + V \psi'. \quad (2.34)$$

Evidentemente, ψ' satisfaz a equação de Schrödinger sem $\mathbf{A}$. Se pudermos resolver a Eq. (2.34), fazer a correção para a presença de um potencial vetor (sem rotacional) será trivial: basta colocar o fator de fase e^{ig} [69].

O fenômeno quântico conhecido como efeito Aharonov-Bohm é objeto de investigação por meio de um experimento de dupla fenda, no qual um solenoide é estrategicamente posicionado. Esse dispositivo provoca uma alteração na fase do padrão de interferência resultante. A manifestação desse fenômeno se evidencia quando feixes de elétrons são direcionados ao redor de um solenoide onde o campo magnético é zero. Ao atingirem o anteparo, observa-se a formação de um padrão de interferência característico. Notavelmente, quando o experimento é conduzido sem a presença do solenoide, é possível constatar um desvio na fase do padrão de interferência. A Fig. 5 mostra esquematicamente essa diferença de fase no padrão de interferência.

Conforme a descrição do experimento, os feixes de elétrons percorrem caminhos distintos até o anteparo, como representado na Fig. 5. Para os caminhos $\mathcal{C}_1$ e $\mathcal{C}_2$, a Eq. (2.25) fornece, respectivamente, os resultados

$$g_1 = \frac{e}{\hbar} \int_{\mathcal{C}_1} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' = \frac{e}{\hbar} \int_0^\pi \frac{\phi}{2\pi r'} r' d\varphi \hat{\varphi} \cdot \hat{\varphi} = \frac{e\phi}{2\hbar}, \quad (2.35)$$

e

$$g_2 = \frac{e}{\hbar} \int_{\mathcal{C}_2} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' = \frac{e}{\hbar} \int_0^\pi \frac{\phi}{2\pi r'} r' d\varphi \hat{\varphi} \cdot (-\hat{\varphi}) = -\frac{e\phi}{2\hbar}. \quad (2.36)$$

Na expressão fornecida, o símbolo do vetor unitário $\hat{\varphi}$ denota a orientação referente aos dois trajetos. No contexto de $\mathcal{C}_1$, observa-se que a variação angular ocorre de 0 a π , com o versor apontando consistentemente para cima. Já em relação a $\mathcal{C}_2$, a abertura angular também varia de 0 a π , contudo, o versor é direcionado para baixo. Deste modo, a diferença de fase é dada por

$$\Delta g = g_1 - g_2 = \frac{e\phi}{2\hbar} - \left(-\frac{e\phi}{2\hbar}\right) = \frac{e\phi}{\hbar}, \quad (2.37)$$

a qual pode ser expressa em termos do fluxo quântico elementar (quantum de fluxo magnético) $\phi_0 = h/e$. Podemos reescrever a diferença de fase como [26]

$$\Delta g = \frac{2\pi\phi}{\phi_0}. \quad (2.38)$$

A desvio de fase no padrão de interferência observado no anteparo, conforme ilustrado na Fig. 5, é produzido pela Eq. (2.38). Neste contexto, o solenoide é posicionado entre os caminhos $\mathcal{C}_1$ e $\mathcal{C}_2$ dos feixes de elétrons. Este fenômeno é esquematizado nas duas barras laterais da Fig. 5: nas condições (a), quando o solenoide está desligado, e (b), no momento em que é ligado, onde há claramente um desvio de fase.

O padrão de interferência é descrito pela densidade de probabilidade e a equação de Schrödinger possui a propriedade de linearidade. Isso significa que, se ψ_1 e ψ_2 são soluções quaisquer da equação de Schrödinger, então a soma das duas soluções $\psi_1 + \psi_2$ também é solução [66]. Entretanto, o importante não é a função de onda, mas a função densidade de probabilidade, a qual é dada em termos do seu módulo quadrado. A diferença é que o módulo quadrado de uma soma não é a soma dos módulos quadrados, ou seja

$$|\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^*\psi_2 + \psi_1\psi_2^*. \quad (2.39)$$

O termo $\psi_1^*\psi_2 + \psi_1\psi_2^*$ no lado direito da Eq. (2.39) é chamado de termo de interferência.

Considerando ψ_1 como a onda que se propaga ao longo do caminho $\mathcal{C}_1$ e ψ_2 pelo caminho $\mathcal{C}_2$, o padrão de interferência pode ser compreendido considerando os feixes com ondas planas³

$$\psi_1 = A e^{(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1)}, \quad (2.40)$$

$$\psi_2 = A e^{(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2)}. \quad (2.41)$$

No primeiro momento, o experimento é feito com solenoide desligado, de modo que a densidade de probabilidade conforme com a Eq. (2.39) é dada por

$$|\psi|^2 = 4A^2 \cos^2 \left(\frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{2} \right), \quad (2.42)$$

³ Usamos ondas planas aqui pela sua simplicidade ao explicar o processo de interferência, fundamentada na densidade de probabilidade da função de onda, mas pode ser generalizada para outros tipos de ondas.

a qual leva a um padrão de interferência do tipo cossenoidal, dependente apenas dos diferentes caminhos tomados pelos feixes ψ_1 e ψ_2 . Com solenoide ligado, as funções de onda são escritas como

$$\psi_1 = A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1 + g_1)}, \quad (2.43)$$

$$\psi_2 = A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2 + g_2)}, \quad (2.44)$$

e a densidade de probabilidade resulta

$$|\psi|^2 = 4A^2 \cos^2 \left(\frac{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{2} + \frac{\Delta g}{2} \right). \quad (2.45)$$

O resultado (2.45) mostra que o efeito da diferença de fase produzida pelo solenoide é um deslocamento no padrão de interferência. O experimento pode ser realizado para funções de onda mais complicadas, como pacotes gaussianos tridimensionais [70].

2.3 O modelo de Tan-Inkson

Considere um elétron confinado a um anel quântico bidimensional. Para este modelo, consideramos a estrutura de aproximação de massa efetiva e a presença de um campo magnético uniforme estático $\mathbf{B}$ ao longo da direção $\mathbf{z}$, e perpendicular ao plano ($x - y$) do QR. Além disso, existe um fluxo magnético fino infinito (fluxo AB) $\phi = l\phi_0$ (com $\phi_0 = h/e$) atravessando o centro do anel 2D. O parâmetro l é uma quantidade contínua. O Hamiltoniano do sistema é escrito como

$$H = \frac{1}{2\mu} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + V(r), \quad (2.46)$$

onde μ e e são a massa efetiva e a carga do elétron, respectivamente. O potencial vetor associado ao campo magnético efetivo é dado por $\mathbf{A} = \frac{1}{2}Br\hat{\phi} + (l\hbar/er)\hat{\phi}$. O potencial de confinamento $V(r)$ inclui uma aproximação para um potencial do tipo parabólico e inverso do quadrado da distância dado por [71]

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0, \quad (2.47)$$

onde a_1 e a_2 são os parâmetros constantes e $V_0 = 2\sqrt{a_1 a_2}$.

Em cenários mais gerais, onde a_1 e a_2 são diferentes de zero, temos um modelo de potencial confinante harmônico para um anel quântico. O potencial resultante é responsável pelo confinamento do elétron, restringindo seu movimento radial. Neste caso, é importante entender sobre o comportamento na região permitida do anel. Para isso, vamos estudar mais algumas propriedades do potencial $V(r)$. Primeiro, vamos determinar o mínimo desse potencial. Fazendo

$$\frac{dV}{dr} = -2\frac{a_1}{r^3} + 2a_2 r = 0, \quad (2.48)$$

obtemos

$$r = \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^{\frac{1}{4}} = r_0, \quad (2.49)$$

o qual demonstra que o ponto de mínimo coincide com o raio médio do anel. Expandindo $V(r)$ em série de Taylor em torno do ponto $r = r_0$, temos

$$V(r) = V(r_0) + \left(\frac{dV}{dr}\right)_{r=r_0} (r - r_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dr^2}\right)_{r=r_0} (r - r_0)^2 + \dots \quad (2.50)$$

Substituindo os valores de $V(r)$ em (2.50) tomados em $r = r_0$ e suas respectivas derivadas, obtemos (até terceira ordem da expansão)

$$V(r) \approx \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 (r - r_0)^2. \quad (2.51)$$

A expressão (2.51) nos diz que, próximo ao ponto de equilíbrio r_0 , o potencial de Tan-Inkson tem o comportamento de um oscilador harmônico, onde μ é a massa efetiva do elétron e $\omega_0 = \sqrt{8a_2/\mu}$ caracteriza a frequência de confinamento transversal (veja a Fig. 6).

Podemos encontrar os raios interno r_- e externo r_+ do anel quântico em termos da energia de Fermi, representados pela relação [71]

$$r_{\pm} = \left(\frac{V_0 + E_F \pm \sqrt{2E_F V_0 + E_F^2}}{2a_1} \right)^{1/2}, \quad (2.52)$$

onde a largura do anel é determinada por $\delta r = (r_+ - r_-)$. As seguintes estruturas podem ser modeladas a partir do potencial (2.47):

1. Ponto Quântico

No limite $a_1 \rightarrow 0$, obtemos o seguinte potencial:

$$V(r) \longrightarrow V_P(r) = a_2 r^2, \quad (2.53)$$

o qual define o potencial confinante para um ponto quântico.

2. Antiponto Quântico

Neste caso, para $a_2 \rightarrow 0$, obtemos

$$V(r) \longrightarrow V_A(r) = \frac{a_1}{r^2}, \quad (2.54)$$

o qual define o potencial de um antiponto quântico. O perfil do potencial para um antiponto é semelhante ao de um ponto quântico visto invertidamente: enquanto o potencial do ponto quântico é uma função convexa, o do antiponto é uma função côncava [1]. Um antiponto refere-se a uma região caracterizada por uma barreira de potencial que repele elétrons [72].

3. Fio Infinito 2D

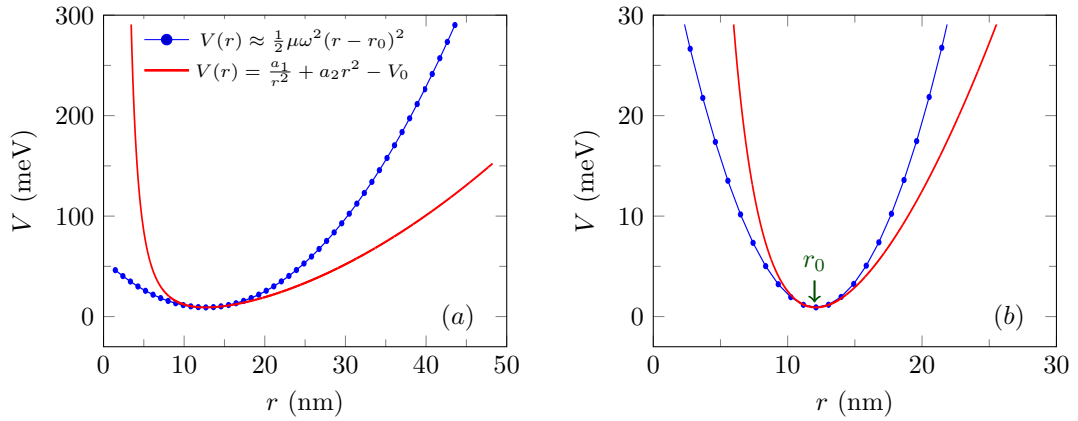
Aqui, tal estrutura é obtida fazendo $r_0 \rightarrow \infty$. Isso vem do fato de que uma reta pode ser vista como uma circunferência de raio infinito.

4. Anel Quântico 1D

Fazendo $a_2 \rightarrow \infty$, temos que $\omega \rightarrow \infty$, por definição.

Para uma análise mais abrangente das estruturas mesoscópicas, recomenda-se a consulta das Refs. [73, 74], as quais abordam de maneira detalhada as propriedades ópticas e eletrônicas.

Figura 6 – Gráfico do potencial de Tan-Inkson (Eq. (2.47)) e do potencial na aproximação harmônica (Eq. (2.51)).



(Cor online) Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 25$ meV, $r_0 = 12$ nm. Fonte: Elaborado pelo autor.

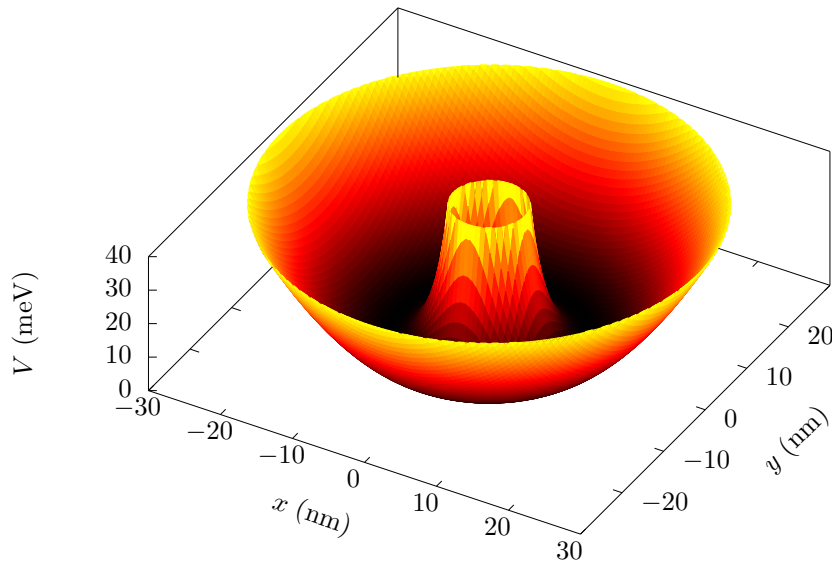
Na Fig. 6, são plotado os perfis dos potenciais (2.47) (linha sólida vermelha) e (2.51) (linha sólida azul), onde podemos ver claramente que em torno do raio médio do anel o potencial tem um comportamento harmônico. A Fig. 6(b) mostra a região ampliada da Fig. 6(a) no entorno de $r_0 = 12$ nm para evidenciar que este é o ponto de equilíbrio estável do sistema e também para confirmar o comportamento parabólico do potencial de Tan-Inkson.

Os parâmetros utilizados na Fig. 6 são referentes a uma amostra de GaAs para o potencial de confinamento radial definido pela Eq. (2.47), com $a_1 = 9,1022 \times 10^6$ meV nm² e $a_2 = 2,222 \times 10^{-5}$ meV nm⁻², os quais fornecem um anel com $r_0 = 12$ nm. A massa efetiva do elétron é $\mu = 0,067 m_e$ (m_e é a massa do elétron no vácuo). Perto do fundo do potencial de confinamento, ele pode ser bem aproximado por um potencial parabólico com $\hbar\omega_0 = 25$ meV. A assimetria radial do potencial confinante é devido ao fato de que a repulsão interna é substancialmente mais forte do que a externa [75].

O gráfico apresentado na Fig. 7 é uma representação tridimensional do potencial de Tan-Inkson (Eq. (2.47)), normalizado para $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. No gráfico, é possível observar a

contribuição tanto do potencial do antiponto quântico quanto do ponto quântico, sendo este último representado pela parede de potencial externa parabólica, que confina a partícula dentro da estrutura tridimensional. Enquanto a parede externa atua como uma barreira de confinamento, restringindo a partícula a regiões específicas, o potencial do antiponto quântico desempenha um papel crucial ao impedir a ocupação eletrônica na região central, caracterizada pela barreira de potencial central. Tal visualização proporciona uma abordagem mais ampla do problema físico em estudo, especificamente à estrutura de confinamento.

Figura 7 – Gráfico tridimensional do potencial de Tan-Inkson (Eq. (2.47)).



(Cor online) Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 25$ meV, $r_0 = 12$ nm. Fonte: Elaborado pelo autor.

Para encontrar as autofunções e os autovalores de energia do sistema, precisamos resolver a equação de Schrödinger

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + il \right)^2 - i \frac{eB}{\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + il \right) + \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} r^2 \right] \psi + \left(\frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0 \right) \psi = E\psi. \quad (2.55)$$

Podemos usar soluções da forma

$$\psi(r, \varphi) = f(r) e^{-im\varphi}, \quad (2.56)$$

onde $m \in \mathbb{Z}$ é o número quântico de momento angular. Substituindo (2.56) na equação de Schrödinger (2.55), obtemos a equação radial

$$f''(r) + \frac{1}{r} f'(r) + \left[-\frac{1}{r^2} M^2 - \frac{\mu^2}{4\hbar^2} \omega^2 r^2 + \gamma' \right] f(r) = 0, \quad (2.57)$$

onde

$$M = \sqrt{(m-l)^2 + \frac{2a_1\mu}{\hbar^2}} \quad (2.58)$$

é o momento angular efetivo,

$$\omega = \sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2} \quad (2.59)$$

é a frequência efetiva,

$$\omega_c = \left(\frac{eB}{\mu} \right) \quad (2.60)$$

é a frequência ciclotrônica,

$$\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}} \quad (2.61)$$

é o comprimento magnético efetivo, e

$$\begin{aligned} \omega_0 &= \sqrt{\frac{8a_2}{\mu}}, \\ \gamma' &= \frac{\mu\omega_c}{\hbar}(m-l) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E). \end{aligned} \quad (2.62)$$

Para expressar a Eq. (2.57) em uma forma canônica conhecida na literatura, faremos algumas manipulações algébricas. Primeiro, definindo a variável adimensional $\xi = \mu\omega r^2/2\hbar$, obtemos a equação diferencial

$$\xi \frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} + \frac{df(\xi)}{d\xi} + \left[-\frac{\xi}{4} + \gamma - \frac{M^2}{4\xi} \right] f(\xi) = 0, \quad (2.63)$$

onde

$$\gamma = \frac{\hbar}{2\mu\omega} \left[\frac{\mu\omega_c}{\hbar}(m-l) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E) \right]. \quad (2.64)$$

Agora, precisamos analisar o comportamento assintótico Eq. (2.63). Pode ser verificado que

$$f(\xi) \propto \xi^{M/2} \quad (\text{para } \xi \rightarrow 0), \quad (2.65)$$

$$f(\xi) \propto e^{-\xi^2/2} \quad (\text{para } \xi \rightarrow \infty). \quad (2.66)$$

Deste modo, podemos usar o seguinte ansatz:

$$f(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^{M/2} \zeta(\xi), \quad (2.67)$$

Substituindo (2.67) na Eq. (2.63), encontramos a equação diferencial

$$\xi \ddot{\zeta} + (M+1-\xi) \dot{\zeta} - \left[\frac{M+1}{2} - \gamma \right] \zeta = 0, \quad (2.68)$$

onde $\dot{\zeta}$ e $\ddot{\zeta}$ representam a primeira e segunda derivada em relação à variável ξ , respectivamente. Sabemos que a equação diferencial do tipo

$$xy''(x) + [c-x]y'(x) - by(x) = 0, \quad (2.69)$$

para $x \in \mathbb{C}$ e com b e $c \in \mathbb{C}$ constantes, é denominada equação hipergeométrica confluyente ou equação de Kummer [76]. Essa equação contém uma singularidade regular em $x = 0$ e uma irregular em $x = \infty$. Uma solução da equação hipergeométrica confluyente é

$$\begin{aligned} y(x) &= {}_1F_1(b; c; x) = \mathbb{M}(b, c, x) \\ &= 1 + \frac{b}{c} \frac{x}{1!} + \frac{b(b+1)}{c(c+1)} \frac{x^2}{2!} + \dots \quad c \neq 0, -1, -2, \dots \end{aligned} \quad (2.70)$$

Essa solução é convergente para todo x finito. Em termos do símbolo de Pochhammer, temos

$$\mathbb{M}(b, c, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(b)_k}{(c)_k} \frac{x^k}{k!}. \quad (2.71)$$

A expressão $\mathbb{M}(b, c, x)$ assume a forma de um polinômio quando o parâmetro b é igual a zero ou um inteiro negativo ($b = 0, -1, -2, \dots = -n$). Esta condição é uma solução válida para representar uma função de onda. Ao comparar a Eq. (2.68) com a Eq. (2.69), conclui-se que

$$\zeta(\xi) = \mathbb{M}(a, c, x) = {}_1F_1 \left[a = - \left(\gamma - \frac{M+1}{2} \right); c = M+1; x = \xi \right]. \quad (2.72)$$

Deste modo, a função de onda do sistema assume a forma

$$\psi(\xi, \varphi) = C e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{M}{2}} \zeta(\xi) e^{-im\varphi}, \quad (2.73)$$

onde C é uma constante arbitrária. Assim, as autofunções do sistema são escritas como

$$\psi(\xi, \varphi) = C_n e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{M}{2}} e^{-im\varphi} {}_1F_1(-n, M+1; \xi^2) \quad (2.74)$$

ou em termos da coordenada radial

$$\psi_{nm}(r, \varphi) = \frac{C_n}{2^{\frac{M}{2}}} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^M e^{-\frac{1}{4} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^2} e^{-im\varphi} {}_1F_1 \left(-n, M+1; \frac{1}{2} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^2 \right), \quad (2.75)$$

onde C_n é a constante de normalização. O espectro de energia é obtida da relação

$$- \left(\gamma - \frac{M+1}{2} \right) = -n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.76)$$

que resolvida para E_{nm} , fornece

$$E_{nm} = \left(n + \frac{M}{2} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{(m-l)}{2} \hbar\omega_c - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2. \quad (2.77)$$

Na ausência de fluxo ($l = 0$) e do potencial do anel ($V(r) = 0$), a partícula está sujeita apenas ao campo magnético uniforme. Neste caso, a energia assume (2.77) assume a forma

$$E_{\bar{n}} = \left(\bar{n} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c, \quad \bar{n} = n + \frac{|m| - m}{2} \geq 0, \quad (2.78)$$

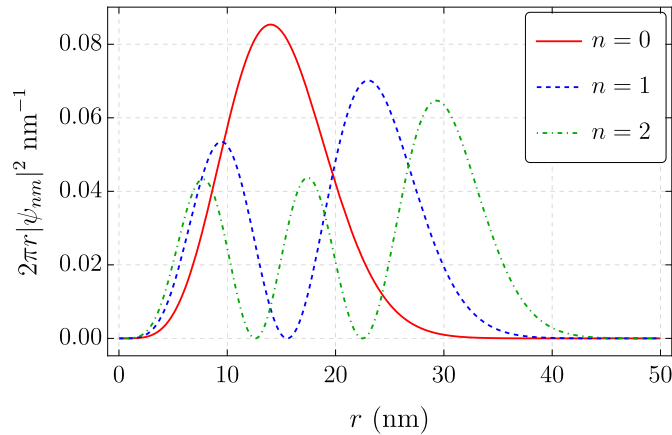
que correspondem aos níveis de Landau [75] (veja a seção 2.1). A função de onda normalizada é dada por

$$\begin{aligned} \psi_{nm}(r, \varphi) = & \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\Gamma[n + M + 1]}{2^{M+1} n! (\Gamma[M + 1])^2 \pi} \right)^{1/2} e^{-im\varphi} \\ & \times e^{-\frac{1}{4}(r/\lambda)^2} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^M {}_1F_1 \left(-n, M + 1; \frac{1}{2} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^2 \right). \end{aligned} \quad (2.79)$$

O cálculo detalhado para determinar a constante de normalização encontra-se no Apêndice C. Os números quânticos n e m caracterizam o movimento radial e o momento angular, respectivamente. No caso particular onde temos um fio circular, n representa o índice de cada sub-banda, e m o número quântico que descreve o movimento longitudinal no fio.

A Fig. 8 mostra o gráfico da função de distribuição de probabilidade para os três primeiros números quânticos n com $m = 0$, onde podemos observar que, para o estado

Figura 8 – Gráfico da distribuição de probabilidade para os três primeiros números quânticos n .



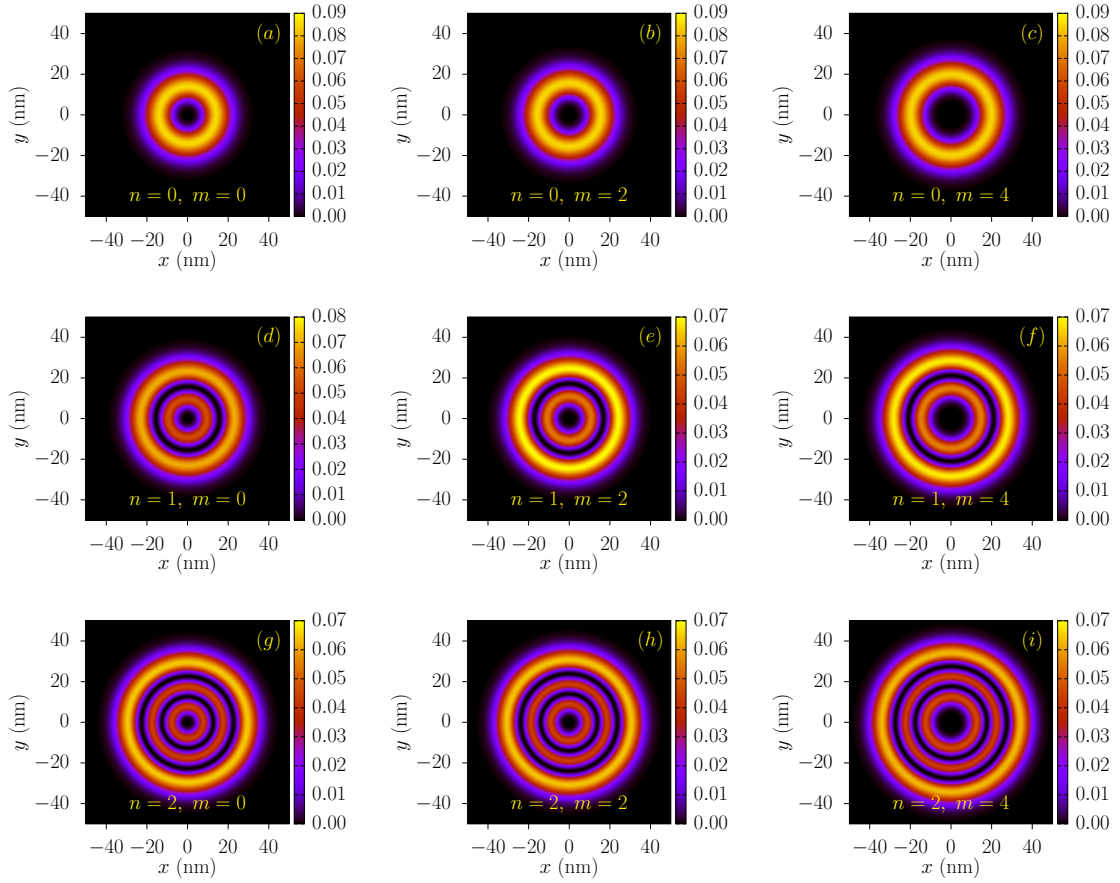
Os valores dos parâmetros utilizados são $\hbar\omega_0 = 25$ meV, $r_0 = 12$ nm, $\phi = 0.5$ h/e e $B = 1$ T. Fonte: Elaborado pelo autor.

fundamental $2\pi r |\psi_{00}|^2$, temos um único pico (indicando um valor máximo) que representa uma maior densidade de probabilidade de se encontrar a partícula. Quando olhamos para os primeiros estados excitados, mais picos surgem, todavia, com probabilidades menores. Esses picos representam regiões localizadas de probabilidade de encontrar-se a partícula.

Uma maneira bem intuitiva de visualizar a geometria anelar dos QRs é construindo a função de distribuição de probabilidade no plano xy da função de densidade. A Fig. 9 exhibe um conjunto de gráficos de densidade correspondente à solução dada por (2.79) no plano transversal normalizado por $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ em nanômetros, para diferentes números quânticos n e m .

Para $m = 0$, a estrutura mostra um núcleo na origem ($x = 0, y = 0$). No estado fundamental, a probabilidade de encontrar o elétron é maior próximo ao centro do anel,

Figura 9 – Densidade de probabilidade normalizada no plano xy para alguns valores de n e m .



(Cor online) Gráfico de densidade para $2\pi r|\psi|^2$ com $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Os valores dos parâmetros utilizados foram os mesmo da Fig. 8. Fonte: Próprio autor.

conforme ilustrado no primeiro gráfico da Fig. 9. Para um dado valor de n , a probabilidade de encontrar a partícula desloca-se do centro à medida que m aumenta, o qual está representado pelo alargamento do máximo em relação ao centro, mostrando a presença de um potencial centrífugo associado a m . Cada gráfico descreve uma densidade de probabilidade associado a cada estado de $2\pi r|\psi_{nm}|^2$, tornando a análise mais intuitiva sobre o comportamento da partícula no anel quântico ao variar os números quânticos n e m . É importante salientar que os gráficos foram gerados para valores pares de m , sem que haja uma razão específica para essa seleção. Na verdade, esses valores poderiam ser arbitrários, contanto que obedeam à condição $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. A escolha de se limitar a valores pares de m foi feita com o propósito de destacar mais claramente os efeitos observados ao variar m .

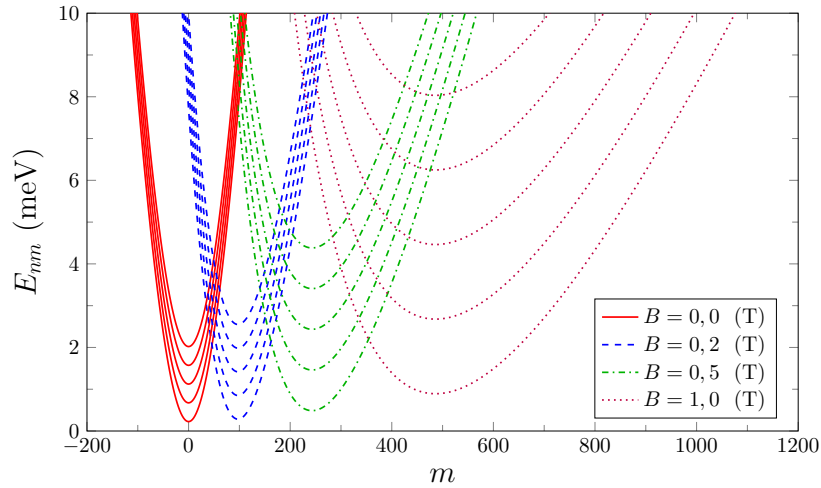
2.4 Análise dos níveis de energia em anéis quânticos

A análise das propriedades eletrônicas é de grande importância para ajudar-nos compreender como os estados se comportam quando submetidos aos efeitos do campo magnético. Para uma melhor compreensão do modelo que será apresentado nos próximos capítulos, nesta seção, reproduzimos alguns resultados da Ref. [71]. Inicialmente, podemos fazer algumas considerações. Assumindo $\omega_c = 0$ (ausência de campo magnético uniforme) na Eq. (2.77), o espectro de energia do anel 2D é escrito como

$$E_{nm} = \left(n + \frac{1}{2} \sqrt{(m-l)^2 + \frac{2a_1\mu}{\hbar^2}} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2. \quad (2.80)$$

A Eq. (2.80) revela que os estados com $m = 0$ são todos simétricos para todas as sub-bandas de energia. O efeito de $\omega_c \neq 0$ produz uma dispersão não parabólica que quebra a simetria presente, revelando a existência de um potencial centrífugo, responsável por tal dispersão. Esse potencial é a razão pela qual diferentes estados de uma mesma sub-banda tem funções de ondas radiais diferentes [71]. A Fig. 10 mostra o gráfico dos níveis de energia em função do número quântico m de um anel 2D (uma heteroestrutura de GaAs) para as cinco sub-bandas mais baixas, assumindo diferentes valores do campo magnético B .

Figura 10 – Gráfico das Sub-bandas como Função do Número Quântico m .



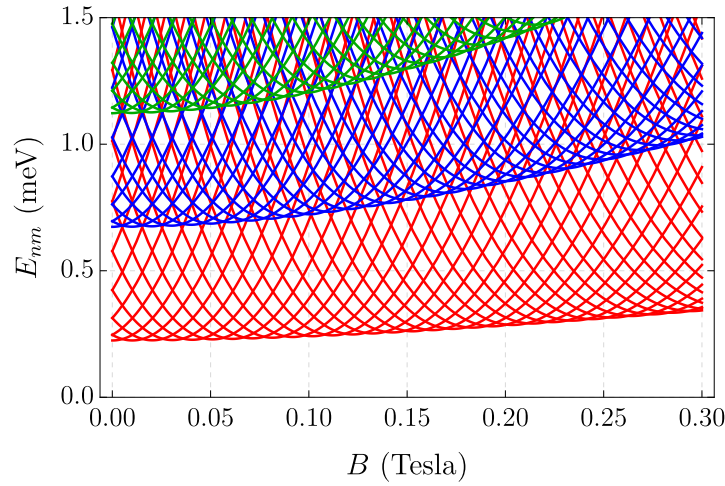
As auto-energias do anel 2D em função do número quântico m para as primeiras cinco sub-bandas mais baixas ($n = 0, 1, 2, 3, 4$) em diferentes intensidades de campo magnético. Os valores dos parâmetros utilizados são $\hbar\omega_0 = 0.449$ (meV), $\phi = 0$ e $r_0 = 800$ nm. Fonte: Adaptada da Ref. [71].

Para o caso em que $B = 0$, as sub-bandas apresentam uma forma parabólica centrada em torno de $m = 0$. À medida que o valor do campo magnético aumenta, é possível observar uma dispersão significativa, evidenciada não apenas pelo aumento da energia nos mínimos das sub-bandas, mas também pelo aumento do espaçamento entre elas [75]. As sub-bandas de energia estão diretamente relacionados com as ondas

estacionárias que se estendem por todo o anel 2D. Além disso, a energia é periodicamente modulada com o campo magnético, o que é conhecido na literatura como oscilações de Aharonov-Bohm [71].

A degenerescência dos estados para o anel quântico pode ser observada na Fig. 11, onde esboçamos o espectro de energia em função do campo magnético. Cada linha representa um número quântico m distinto, enquanto linhas de mesma cor representam o mesmo número quântico n , os quais caracterizam uma sub-banda do sistema. Ou seja, cada curva representa um estado ψ_{nm} distinto do sistema. Percebe-se que o espectro de energia em função do campo magnético aplicado é aperiódico, especialmente quando mais de uma sub-banda está ocupada [71]. Na Fig. 12 representa os autovalores de

Figura 11 – Gráfico das Sub-bandas como Função do Campo magnético.

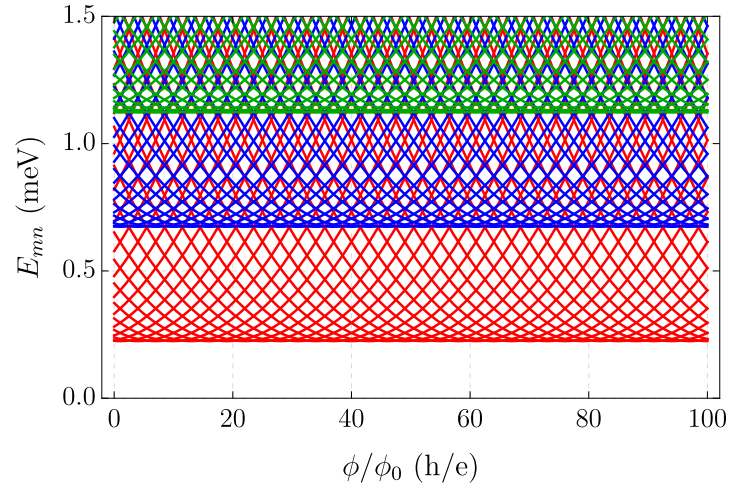


Três sub-bandas mais baixas — $n = 0$, $n = 1$, $n = 2$. Os valores dos parâmetros utilizados são $\hbar\omega_0 = 0.449$ (meV), $\phi = 0$ e $r_0 = 800$ nm. Fonte: Adaptada da Ref. [71].

energia em função do fluxo magnético, percebe-se que é uma função periódica do fluxo quântico com período ϕ_0 . O gráfico da Fig. 13 é uma ampliação da Fig. 11 em que é mostrado de maneira esquemática o espectro de energia no estado fundamental (partes das curvas em vermelho) para um elétron que exhibe oscilações em função do campo magnético (Oscilações Aharonov-Bohm ⁴). Percebe-se que em cada máximo de energia ocorre uma transição no estado fundamental. Neste ponto de interseção, o número quântico de momento angular m do estado fundamental muda de uma unidade, ou seja, há troca de momento angular entre os estados [77]. Essas características nas propriedades eletrônicas, em especial, o espectro de energia do anel quântico em termos do campo e fluxo magnético é de interesse científico, principalmente, a investigação do efeito Aharonov-Bohm. Os capítulos subsequentes serão direcionados à investigação deste fenômeno específico durante as transições ópticas observadas em materiais semicondutores.

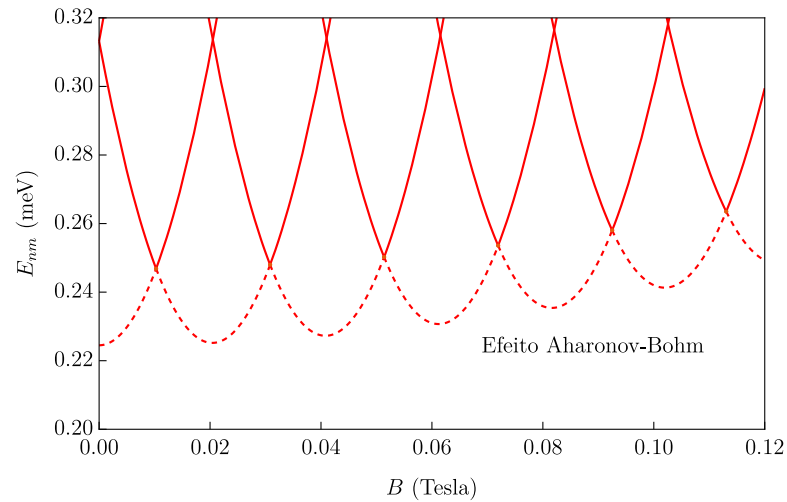
⁴ As oscilações Aharonov-Bohm se referem ao comportamento da energia de um determinado elétron ao transitar entre diferentes estados ψ_{nm} à medida que o campo ou o fluxo magnético variam [75].

Figura 12 – Gráfico das Sub-bandas como Função do fluxo magnético.



Três sub-bandas mais baixas — $n = 0$, $n = 1$, $n = 2$. Os valores dos parâmetros utilizados são $\hbar\omega_0 = 0.449$ (meV), $B = 0$ e $r_0 = 800$ nm. Fonte: Adaptada da Ref. [71].

Figura 13 – Ilustração das Oscilações Aharonov-Bohm



Oscilação Aharonov-Bohm para a sub-banda mais baixa $n = 0$ —. As curvas tracejadas --- indicam o estado fundamental que altera seu número quântico m em uma unidade. Os valores dos parâmetros utilizados foram os mesmos da Fig. 10. Fonte: Elaborado pelo autor

3 SEÇÃO DE CHOQUE DE FOTOIONIZAÇÃO PARA O MODELO DE ANEL QUÂNTICO 2D

Neste capítulo, investigamos a seção de choque de fotoionização (SCF), para um anel quântico bidimensional constituído de GaAs e mostramos como o efeito Aharonov–Bohm se manifesta ao variar alguns parâmetros do modelo. A seção de choque de fotoionização representa a probabilidade de que um elétron ligado possa ser liberado por alguma radiação apropriada com energia $\hbar\omega$ de uma certa frequência. Sua magnitude é profundamente influenciada pelo potencial de confinamento e pela energia do fóton [78,79]. O potencial de confinamento que usamos é o da Eq. (2.47).

A dependência da energia de excitação no processo de fotoionização é derivada da regra de ouro de Fermi usando a conhecida aproximação dipolo escrita na forma [58,80,81]

$$\sigma(\hbar\omega) = C_{n_r} \hbar\omega \sum_f |\langle \psi_{n,m} | \mathbf{r} | \psi_{n',m'} \rangle|^2 \delta(E_{n,m}^{(f)} - E_{n,m}^{(i)} - \hbar\omega), \quad (3.1)$$

onde a constante C_{n_r} considera as propriedades elétricas e ópticas do material semiconductor sendo dado por:

$$C_{n_r} = \left(\frac{\xi_{\text{eff}}}{\xi_0} \right)^2 \frac{n_r}{\epsilon} \frac{4\pi^2}{3} \alpha_{\text{fs}}, \quad (3.2)$$

onde n_r é o índice óptico de refração, ϵ é a constante dielétrica óptica e $\alpha_{\text{fs}} = e^2/\hbar c$ representa a constante de estrutura fina. Os termos em parênteses na Eq. (3.2) é devido à modificação do campo eletromagnético no semiconductor, onde ξ_{eff}/ξ_0 é a razão do campo elétrico efetivo, com ξ_{eff} representando a amplitude do campo elétrico da radiação incidente e ξ_0 o campo médio no semiconductor. Essa razão não afeta a forma da seção de choque e, no presente momento, não há nenhum dado experimental disponível na literatura para a comparação [10]. Assim, vamos tomar essa razão igual a 1 e não a incluiremos explicitamente em nossos resultados. Para mais detalhes sobre essa razão veja a Ref. [65].

Podemos definir $\langle \psi_{n,m}^{(i)} | \mathbf{r} | \psi_{n,m}^{(f)} \rangle \equiv \mathcal{M}_{if}$ como sendo o elemento da matriz entre os estados inicial e final do momento de dipolo. As funções $\psi_{n,m}^{(i)}$ e $\psi_{n,m}^{(f)}$ simbolizam as funções de onda dos estados inicial e final, enquanto $E_{n,m}^{(f)}$ e $E_{n,m}^{(i)}$ correspondem aos respectivos autovalores de energia da transição. No Apêndice A é demonstrado o cálculo do elemento da matriz de transição. Deste resultado, vemos que os elementos não nulos da matriz seguem a regra de seleção $\Delta m = \pm 1$.

Devido a topologia do anel, usamos coordenadas polares no cálculo da seção de

choque de fotoionização através da relação

$$\sigma(\hbar\omega) = \frac{4\pi^2}{3} \frac{n_r}{\epsilon} \alpha_{\text{fs}} \hbar\omega \left| \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \psi_{nm}^{(f)*}(\rho, \varphi) \psi_{nm}^{(i)}(\rho, \varphi) \rho^2 \cos\theta d\rho d\varphi \right|^2 \delta(E_{nm}^{(f)} - E_{nm}^{(i)} - \hbar\omega), \quad (3.3)$$

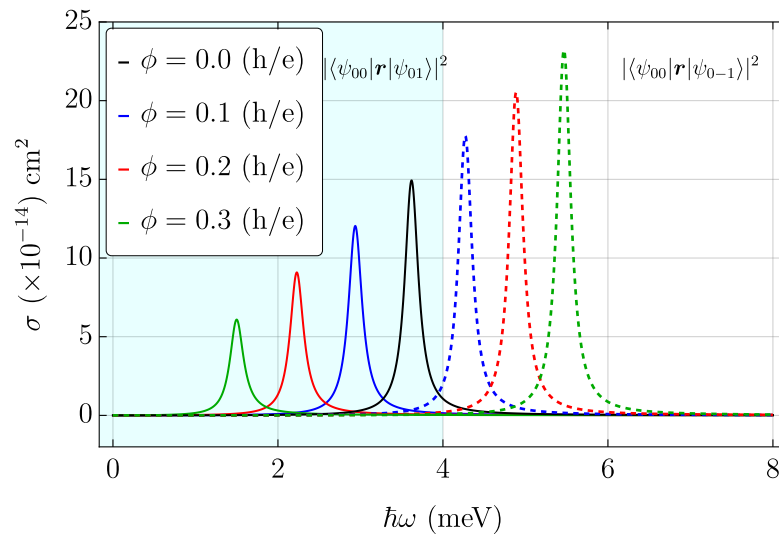
onde a função de onda $\psi_{nm}(\rho, \varphi)$ é dada na (2.79) e $r(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{z}}) = z = \rho \cos\theta$. Para a função $\delta(E_{nm}^{(f)} - E_{nm}^{(i)} - \hbar\omega)$, usamos a representação dada em termos da Lorentziana

$$\delta(E_{nm}^{(f)} - E_{nm}^{(i)} - \hbar\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar\Gamma_f}{(E_{nm}^{(f)} - E_{nm}^{(i)} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_f)^2}, \quad (3.4)$$

onde Γ_{fi} representa a taxa de relaxamento entre os estados inicial e final. Além disso, essa taxa está relacionada ao tempo τ_{fi} da transição $|\psi_{nm}^{(i)}\rangle \rightarrow |\psi_{nm}^{(f)}\rangle$, com $\Gamma_{fi} = 1/\tau_{fi}$ [82].

Para fins de comparação com a literatura e obtermos resultados mais consistentes, conduzimos a uma investigação numérica, explorando dados relevantes prontamente disponíveis na literatura, em particular, para o caso de um anel quântico 2D de GaAs. A partir de agora, apresentamos a análise numérica detalhada dos nossos resultados. A Fig. 14 mostra a seção de choque de fotoionização (Eq. (3.3)) em função de $\hbar\omega$ (energia do fóton incidente) para diferentes valores de ϕ . Todos os cálculos numéricos foram realizados usando os seguintes parâmetros: $\epsilon = 13.1$, $\mu = 0.067 \mu_e$, onde $\mu_e = 9.1094 \times 10^{-31} \text{ eV}/c^2$, $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$, $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ Tm/A}$, e $c = 2.99 \times 10^8 \text{ m/s}$ [83]. Também consideramos os valores específicos: $n_r = 3.15$, $\alpha_{\text{fs}} = 1/137$, e $\xi_{\text{eff}}/\xi_0 = 1$ [84]. Do mesmo modo para $\hbar\Gamma_f = 0.1 \text{ meV}$ [82]. Para esta figura, temos que, ao variar o fluxo AB, as

Figura 14 – Gráfico da seção de choque de fotoionização em função do fluxo



Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 25 \text{ meV}$, $r_0 = 12 \text{ nm}$ e $B = 0 \text{ T}$. Fonte: Elaborado pelo autor.

amplitudes dos picos da SCF muda proporcionalmente para duas transições ópticas partindo do estado fundamental para os estados adjacentes, conforme a regra de seleção. A

razão de tal comportamento é que a função de onda depende do fluxo AB aplicado. Além disso, percebe-se que a posição do pico sofre um deslocamento para baixas energias (red shift) com o aumento do fluxo AB, região azulada, na qual a transição óptica ocorre do estado ψ_{00} para o estado ψ_{01} .

O efeito inverso é observado quando a transição ocorre do estado ψ_{00} para ψ_{0-1} , onde os picos da SCF se deslocam para valores de energias mais altas a medida que o fluxo AB (blue shift). A explicação para este comportamento está na diferença de energia entre os dois estados na qual a transição óptica ocorreu. Por exemplo, o desvio para o vermelho mostra que a diferença de energia entre dois estados quânticos considerado será reduzido a medida que o fluxo AB aumenta. Em contrapartida, ocorre o contrário com o desvio para o azul. Para demonstrar mais explicitamente esse efeito, consideramos as transições entre os estados com $\phi = 0.1$ (h/e) e $\phi = 0.2$ (h/e), respectivamente, dadas por

$$E_{fi}^1 = E_f - E_i = 2,9355 \text{ meV} \longrightarrow |\langle \psi_{00} | \psi_{01} \rangle|^2, \quad (3.5)$$

$$E_{fi}^2 = E_f - E_i = 2,2264 \text{ meV} \longrightarrow |\langle \psi_{00} | \psi_{01} \rangle|^2, \quad (3.6)$$

de modo que

$$E_{fi}^1 > E_{fi}^2. \quad (3.7)$$

As transições (3.5) e (3.6) foram obtidas usando a Eq. (2.77) e, subsequentemente, são usadas para computar a lorentziana Eq. (3.4). Podemos notar que a diferença de energia para a mesma transição diminui com o acréscimo do fluxo magnético, como explicado anteriormente. Para as outras transições, temos

$$E_{fi}^1 = E_f - E_i = 4,2696 \text{ meV} \longrightarrow |\langle \psi_{00} | \psi_{0-1} \rangle|^2, \quad (3.8)$$

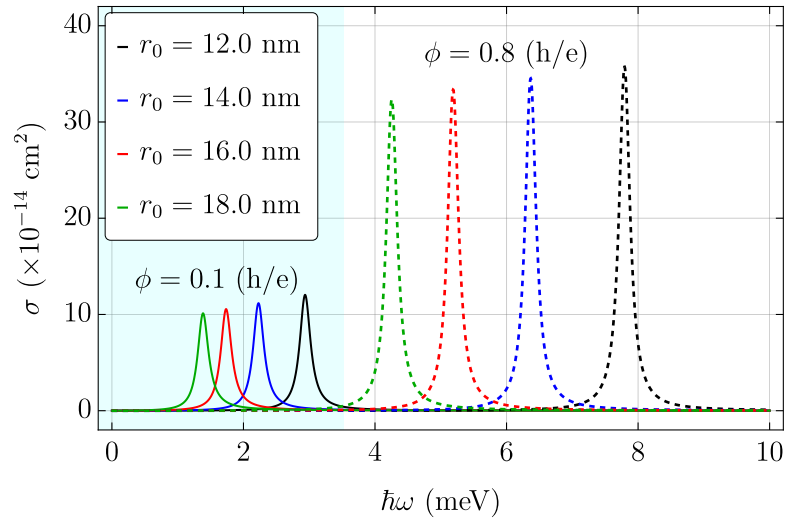
$$E_{fi}^2 = E_f - E_i = 4,8863 \text{ meV} \longrightarrow |\langle \psi_{00} | \psi_{0-1} \rangle|^2. \quad (3.9)$$

Neste caso, a desigualdade se inverte, ou seja

$$E_{fi}^1 < E_{fi}^2. \quad (3.10)$$

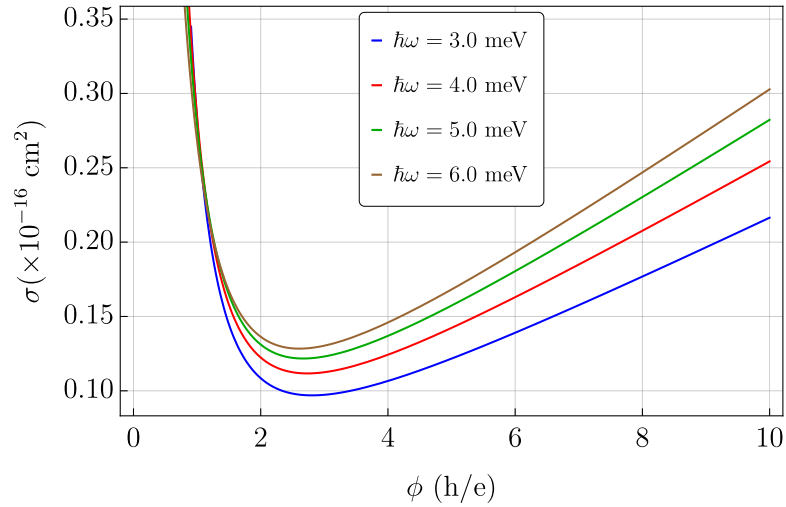
Em contrapartida, na Fig. 15 é mostrado um aspecto interessante. A medida que r_0 diminui, a magnitude do pico aumenta e sua posição muda para valores de energias mais altas. A razão física para a ocorrência desse comportamento é o fato de haver uma maior probabilidade da transição óptica ocorrer entre os estados ψ_i e ψ_f em um anel quântico mais estreito [11]. Na figura ainda é possível notar que a região destacada em azul é construída atribuindo-o um valor fixo de fluxo magnético igual a 0.1 (h/e) (representadas pela curvas sólidas). Ao fazer uma pequena variação no ϕ , atribuindo-o valor de 0.8 (h/e), os valores de picos (representados pelas curvas tracejadas) saltam para valores maiores de SCF. Isto o mostra o efeito de uma mudança no fluxo AB na probabilidade da ocorrência de uma transição óptica no QR.

Figura 15 – Gráfico da seção de choque de fotoionização em função da energia do fóton incidente para diferentes valores de fluxo



Os valores dos parâmetros utilizados foram os mesmos da Fig. 14. Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 16 – Gráfico da seção de choque de fotoionização em função de ϕ .



Os valores dos parâmetros utilizados são os mesmos da Fig. 14. Fonte: Elaborado pelo autor.

Como um dos principais objetivos neste capítulo é investigar o efeito Aharonov–Bohm presente na seção de choque de fotoionização, plotamos o perfil da curva da SCF em função de ϕ na Fig. 16 para diferentes valores de $\hbar\omega$. Como esperado, a curva apresenta um caráter não monotônico, o que concorda com o apresentado na literatura [10,11]. Podemos notar que a probabilidade da transição ocorrer é maior para fótons mais energéticos.

Parte II

Propriedades eletrônicas e ópticas de anéis
quânticos 2D sob efeitos de rotação

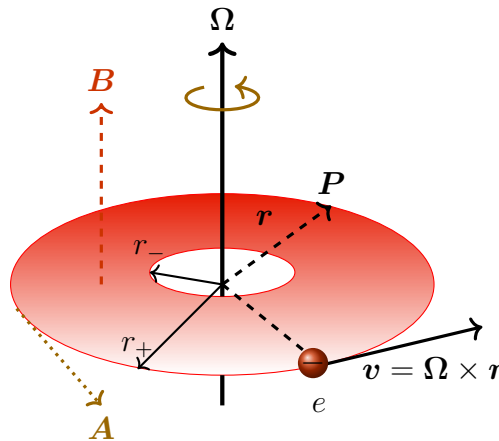
4 MODELO DE ANEL QUÂNTICO 2D SOB EFEITO DE ROTAÇÃO

Neste capítulo, estudamos a mecânica quântica não relativística de uma partícula vinculada a movimentar-se em um anel quântico 2D sob efeitos de rotação. Também consideramos a presença de um tubo de fluxo magnético (efeito AB) e do campo magnético uniforme. Não levamos em consideração os efeitos do spin da partícula em nossa abordagem. Nosso principal objetivo é determinar as autofunções e os autovalores de energia, e depois compará-los com os resultados obtidos no Capítulo 2 (caso de anéis quânticos na ausência de rotação).

4.1 Descrição do modelo de anel quântico 2D sob efeitos de rotação

A descrição do modelo de uma partícula em um referencial girando é usualmente feita via acoplamento mínimo diretamente no hamiltoniano do sistema. A Fig. 17 retrata esquematicamente uma partícula confinada a um QR situado referencial girando. O anel também está sujeito a um campo magnético uniforme e na presença do efeito AB. Os elétrons são restritos à faixa delimitada pelos raios interno r_- e externo r_+ (área totalmente preenchida na Fig. 17). A dinâmica desse sistema leva em conta os efeitos de rotação e

Figura 17 – Ilustração de um elétron em um referencial girando com velocidade angular Ω em torno de $\hat{z}$.



Fonte: Adaptada da Ref. [38].

pode ser incluído na equação de movimento através do acoplamento mínimo [85]

$$p^\tau \rightarrow p^\tau - \mu \mathcal{A}^\tau, \quad (\tau = 0, 1, 2, 3), \quad (4.1)$$

onde μ é a massa da partícula e $\mathcal{A}^\tau$ é o campo de calibre para o referencial girante, definido como [86]

$$\mathcal{A}^\tau = (\mathcal{A}_0, \mathbf{A}) = \left(-\frac{1}{2}v^2, \mathbf{v} \right), \quad (4.2)$$

onde $\mathbf{v}$ é vetor velocidade da partícula, a qual está relacionada com a velocidade angular $\boldsymbol{\Omega}$ como $\mathbf{v} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}$ (veja a Fig. 17), onde $\mathbf{r}$ é o vetor posição que vai desde o centro do anel até onde a partícula está localizada. Além disso, há uma interação do sistema com um campo magnético uniforme $\mathbf{B}$, que juntamente com $\boldsymbol{\Omega}$, estão orientados na direção positiva de $\hat{\mathbf{z}}$, e segue restritamente a regra da mão direita. Por outro lado, caso esteja orientado no sentido contrário, apresentará comportamentos físicos distintos. Essas características serão discutidas mais adiante.

A interação de uma partícula carregada com o campo magnético é descrita através do acoplamento (4.1). Neste caso, o quadripotencial é definido como $A^\tau = (\phi/c, \mathbf{A})$. O hamiltoniano que descreve o movimento da partícula no referencial girando é escrito como [85, 87]

$$H_\Omega = \frac{1}{2\mu} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{L} + V(\mathbf{r}), \quad (4.3)$$

onde $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ é o momento angular da partícula e $V(\mathbf{r})$ é o potencial escalar definido na Eq. (2.47) responsável pelo confinamento da partícula. Onde as quantidades $\mathbf{r}$, $\mathbf{p}$ e $\mathbf{L}$ são operadores hermitianos que atuam na função de onda no espaço de Hilbert.

Para o presente modelo, consideramos o modelo idealizado onde a amostra gira com uma velocidade angular constante ($\dot{\boldsymbol{\Omega}} = 0$) em torno do eixo $\mathbf{z}$, isto é, $\boldsymbol{\Omega} = \Omega \hat{\mathbf{z}}$, com $\mathbf{r} = (r_0, 0, 0)$ sendo um vetor que localiza um ponto fixo $\mathbf{P}$ como mostrado na Fig. 17.

4.2 Potencial de Confinamento de Tan-Inkson em anel quântico sob efeitos de rotação

Nesta seção, estudamos o confinamento do elétron em um anel quântico 2D (potencial de Tan-Inkson) sob efeitos de rotação. Consideramos a configuração de campo magnético externo composta por duas contribuições já definida antes, a saber, o campo uniforme na direção $\mathbf{z}$ e um fluxo de Aharonov-Bohm. Tal configuração de campo é dado por $\mathbf{B} = (B + \phi \delta^2(r)) \hat{\mathbf{z}}$ onde $\delta^2(r)$ é a distribuição delta bidimensional. Este campo magnético é gerado pelo seguinte potencial vetorial

$$\mathbf{A} = \left(\frac{B}{2}r + \frac{\phi}{2\pi} \frac{1}{r} \right) \hat{\boldsymbol{\phi}} \quad (4.4)$$

onde $\phi = \ell \phi_0$ ($\phi_0 = h/e$), e a rotação ocorre em torno de um eixo $\mathbf{z}$ com uma velocidade angular $\boldsymbol{\Omega} = \Omega \hat{\mathbf{z}}$.

O hamiltoniano para este potencial é escrito como

$$\mathcal{H}_\Omega = \frac{1}{2\mu} (\mathbf{p} - e\mathbf{A} - \mu\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 - \frac{1}{2}\mu (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 + V(r), \quad (4.5)$$

onde $V(r)$ é o potencial de Tan-Inkson definido na Eq. (2.47). Considerando os campos e potenciais definidos anteriormente, a equação de Schrödinger a ser resolvida é

$$\frac{1}{2\mu} (\mathbf{p} - e\mathbf{A} - \mathbf{A}_\Omega)^2 \Upsilon - \frac{1}{2}\mu \mathbf{A}_\Omega^2 \Upsilon + \frac{a_1}{r^2} \psi + a_2 r^2 \Upsilon = (E + V_0) \Upsilon. \quad (4.6)$$

O termo $\mathbf{A}_\Omega = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}$, tem origem no acoplamento mínimo e pode ser entendido como um campo de calibre, um potencial vetor efetivo, associado ao efeito não-inercial do referencial girante. Devido à simetria radial do problema usaremos o seguinte ansatz para as autofunções na forma

$$\Upsilon(r, \varphi) = R(r) e^{im\varphi}, \quad (4.7)$$

onde $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ é o número quântico momento angular. Após substituir (4.7) em (4.6), obtemos

$$\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - il \right)^2 - \frac{2\mu a_1}{\hbar^2} \right] - \left[\frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} + \frac{4\mu B e \Omega}{4\hbar^2} + \frac{2\mu a_2}{\hbar^2} \right] r^2 - \left(\frac{ie}{\hbar} \right) \left(B + \frac{2\mu}{e} \Omega \right) \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - il \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (V_0 + \mathcal{E}) \right] R(r) e^{im\varphi} = 0, \quad (4.8)$$

que fornece a equação radial

$$R'' + \frac{1}{r} R' + \left[-\frac{1}{r^2} L^2 - \frac{\mu^2}{4\hbar^2} \varpi^2 r^2 + \gamma' \right] R = 0, \quad (4.9)$$

com

$$\gamma' = \frac{\mu\omega^*}{\hbar} (m - l) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (V_0 + \mathcal{E}), \quad (4.10)$$

onde temos definido as grandezas

$$\omega_c^2 = \left(\frac{eB}{\mu} \right)^2, \quad (4.11)$$

$$\omega_0^2 = \frac{8a_2}{\mu}, \quad (4.12)$$

$$\varpi^2 = \omega_c^2 + 4\Omega\omega_c + \omega_0^2, \quad (4.13)$$

$$\omega^* = \omega_c + 2\Omega, \quad (4.14)$$

$$L^2 = (m - l)^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}. \quad (4.15)$$

Se considerarmos a rotação sendo zero $\Omega \rightarrow 0$ e a partícula livre do confinamento do anel $a_1 \rightarrow 0$, $a_2 \rightarrow 0$, temos que a Eq. (4.13) torna-se

$$\varpi = \omega_c, \quad (4.16)$$

ou seja, a frequência ciclotrônica ω_c , fará o papel da frequência de Landau ϖ [87].

Fazendo uma mudança de variável, $\xi = \mu\varpi r^2/2\hbar$, podemos reescrever a Eq. (4.9) como

$$\xi\ddot{R} + \dot{R} + \left[-\frac{\xi}{4} + \gamma - \frac{L^2}{4\xi}\right] R = 0, \quad (4.17)$$

onde

$$\gamma = \frac{\hbar}{2\mu\varpi} \left[2\mu \frac{V_0 + \mathcal{E}}{\hbar^2} + \frac{\mu\omega^*}{\hbar} (m - l) \right]. \quad (4.18)$$

Agora, fazendo análise assintótica da Eq. (4.17) para os limites $\xi \rightarrow 0$ e $\xi \rightarrow \infty$, podemos mostrar que a solução da parte radial tem a forma

$$R(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^{L/2} \zeta(\xi), \quad (4.19)$$

onde a função $\zeta(\xi)$ obedece a equação diferencial

$$\xi\ddot{\zeta} + (L + 1 - \xi)\dot{\zeta} - \left[\frac{L + 1}{2} - \gamma\right] \zeta = 0. \quad (4.20)$$

Pode ser mostrado que a Eq. (4.20) é uma equação diferencial do tipo Kummer e sua solução é dada em termos da função hipergeométrica confluyente

$$\zeta(\xi) = {}_1F_1 \left[-\left(\gamma - \frac{L + 1}{2}\right); L + 1; \xi \right]. \quad (4.21)$$

A expressão para os níveis de energia que, neste caso, envolve o termo de rotação, segue os mesmos passos que as utilizadas no Capítulo 2, ou seja, o primeiro parâmetro da função (4.21) satisfaz a seguinte condição

$$-\left(\gamma - \frac{L + 1}{2}\right) = -n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.22)$$

Substituindo a Eq. (4.18) em Eq. (4.22), obtemos

$$-\left(\frac{\hbar}{2\mu\varpi} \left[2\mu \frac{V_0 + \mathcal{E}}{\hbar^2} + \frac{\mu\omega^*}{\hbar} (m - l) \right] - \frac{L + 1}{2}\right) = -n. \quad (4.23)$$

Resolvendo (4.23) para $\mathcal{E}$, encontramos

$$\mathcal{E}_{nm} = \left(n + \frac{L}{2} + \frac{1}{2}\right) \hbar\varpi - \frac{1}{2} (m - l) \hbar\omega^* - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2. \quad (4.24)$$

Este resultado mostra que o autovalor de energia quantizado depende dos números quânticos n e m , o qual n é o número quântico que caracteriza o movimento da partícula na direção radial e m , o momento angular. Além disso, os níveis de energia são caracterizados por três frequências. O primeiro, ϖ , depende do campo magnético, do coeficiente a_2 do potencial de confinamento e da velocidade angular Ω . A segunda frequência ω^* depende da frequência ciclotrônica ω_c e da frequência angular de rotação Ω . E por fim, a terceira frequência ω_0 é uma característica do potencial de confinamento e depende exclusivamente do parâmetro a_2 [87].

As autofunções são obtidas substituindo (4.21) nas soluções (4.19) e (4.7), dadas pelas funções de onda não normalizadas. Neste caso, temos

$$\Upsilon(r, \varphi) = C_n \left(\frac{1}{2L} \right)^{1/2} \left(\frac{r}{\lambda_0} \right)^L e^{-\frac{r^2}{4\lambda_0^2}} {}_1F_1 \left[-n; L+1; \frac{r^2}{2\lambda_0^2} \right] e^{im\varphi}, \quad (4.25)$$

onde

$$\lambda_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\varpi}}. \quad (4.26)$$

Seguindo a mesma receita do Capítulo 2, a densidade de probabilidade da função onda deve ser igual a 1 em todo o espaço de integração. Deste modo, obtemos o valor da constante de normalização. As autofunções de onda normalizadas são

$$\Upsilon_{n,m}(r, \varphi) = \frac{1}{\lambda_0} \sqrt{\frac{\Gamma(L+n+1)}{2^{L+1}\pi n! [\Gamma(L+1)]^2}} \left(\frac{r}{\lambda_0} \right)^L e^{-\frac{1}{4}\left(\frac{r}{\lambda_0}\right)^2} {}_1F_1 \left[-n; L+1; \frac{r^2}{2\lambda_0^2} \right] e^{im\varphi}. \quad (4.27)$$

Para $\Omega = 0$, a função de onda é dada pela Eq. (2.79) do Capítulo 2, para o caso sem rotação, ou seja, $\Upsilon_{nm}(r, \varphi) = \psi_{nm}(r, \varphi)$.

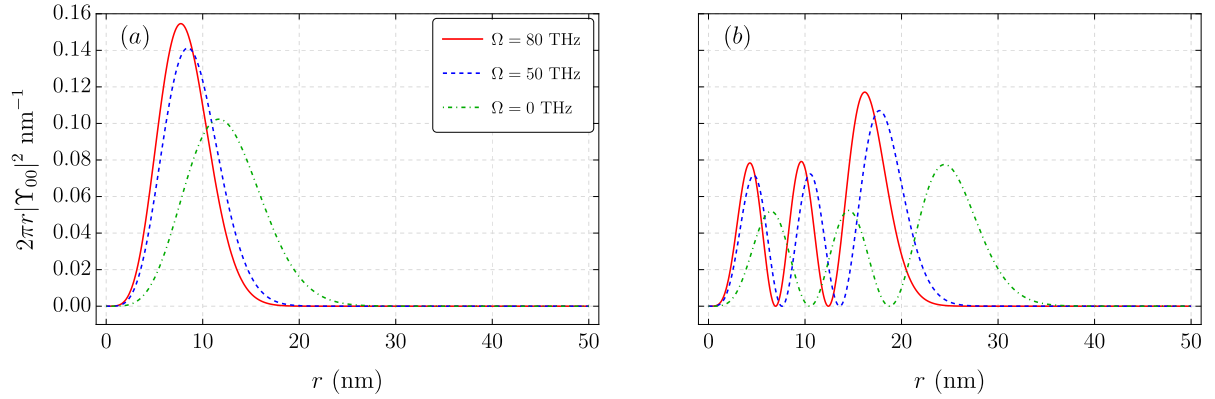
Como a função de onda depende do parâmetro de rotação, os efeitos não-inercias estão presentes. Uma forma de explorar tais efeitos é esboçar alguns gráficos da densidade de probabilidade $2\pi r |\Upsilon_{nm}|^2$, explorando alguns valores da velocidade angular, incluindo o zero. Compara para rotações positivas e negativas, implicando em considerar a orientação do vetor angular $\mathbf{\Omega}$ em relação ao eixo $\mathbf{z}$, seguindo a regra da mão direita. Tal análise determina se o sistema está executando um movimento rotacional no sentido horário ou anti-horário. Os valores de velocidades angulares estarão em terahertz¹ (THz.) em função do raio r em nanômetro, tanto positivos quanto negativos.

A Fig. 18(a) exhibe de maneira coesa a densidade de probabilidade de se encontrar uma partícula no anel quântico 2D. Nota-se que para o estado eletrônico fundamental ($n = 0, m = 0$) a medida que a rotação aumenta há uma maior concentração de estados eletrônicos próximo ao centro do anel, na Fig. 18(b) também é possível notar os efeitos da rotação para outros estados além do fundamental, estados excitados, neste caso para $n = 2$ e $m = 1$.

Para rotações negativas, temos que a densidade de probabilidade diminui a medida que a velocidade angular se afasta de zero, e o pico ressonante se afasta do centro do anel conforme é mostrado na Fig. 19, comportamento semelhante ao gráfico da Fig. 18. Para esta configuração e parâmetros que estamos trabalhando, a medida que a velocidade angular aumenta a concentração de estados eletrônicos se aproxima do centro do anel e, claro, de maneira esperada, a medida que a velocidade angular diminui a densidade de probabilidade se afasta cada vez mais do centro, o que ficou evidente para os valores de Ω negativo. Vale ressaltar que a velocidade angular tratada nas análises estão na ordem do terahertz, ou

¹ É uma unidade de medida de frequência equivalente a um trilhão de Hertz, $1 \text{ Hz} = 10^{12} \text{ THz}$

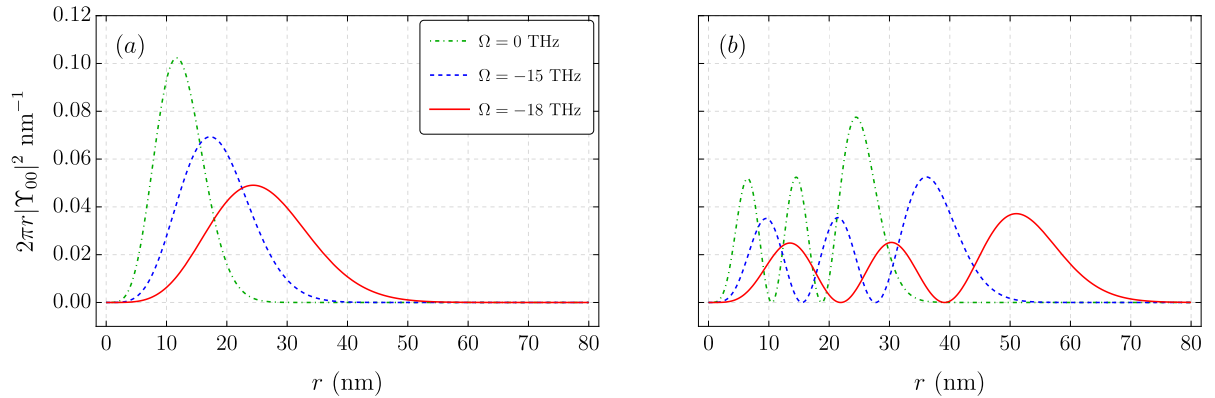
Figura 18 – Função de distribuição de probabilidade para rotações positivas.



(Cor online) Os valores dos parâmetros utilizados são $\hbar\omega_0 = 25 \text{ meV}$, $r_0 = 12 \text{ nm}$, $\phi = 0.5 \text{ h/e}$ e $B = 15 \text{ T}$. Em (a), plotamos o estado Υ_{00} e, em (b), o estado Υ_{21} . Fonte: Elaborado pelo autor.

seja, precisamos de uma velocidade muito alta para observar explicitamente os efeitos da rotação em nossas análises. Elaboramos a representação da densidade de probabilidade

Figura 19 – Função de distribuição de probabilidade para rotações negativas.

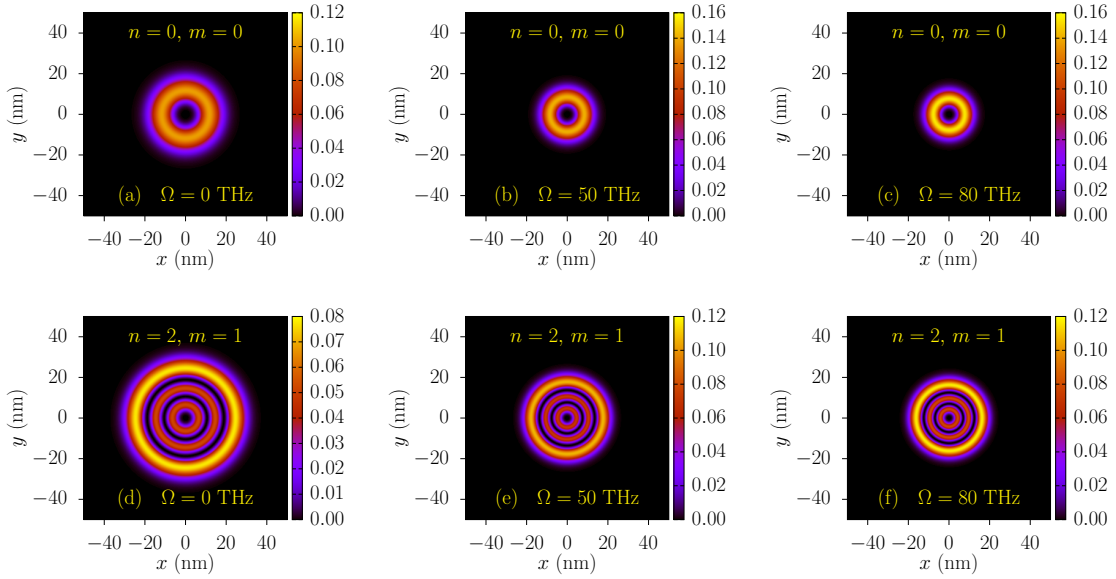


(Cor online) Os valores dos parâmetros utilizados foram $\hbar\omega_0 = 25 \text{ meV}$, $r_0 = 12 \text{ nm}$, $\phi = 0.5 \text{ h/e}$ e $B = 15 \text{ T}$. Em (a), plotamos para o estado Υ_{00} e, em (b), para o estado Υ_{21} . Fonte: Elaborado pelo autor.

normalizada no plano xy , em que cada cor é referente a um valor numérico associado à densidade. A Fig. 20 ilustra uma série de distribuições de densidade de probabilidade normalizada no plano xy considerando $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. À medida que a rotação aumenta, é possível observar que a probabilidade de encontrar a partícula se aproxima do centro ($x = 0$ e $y = 0$), evidenciada pelas cores mais claras, destacando a contribuição do termo centrífugo. A Fig. 20 mostra a função densidade para os estados Υ_{00} e Υ_{21} em função da velocidade angular para os valores de rotação iguais a 0 THz , 50 THz e 80 THz , o mesmo estado quântico pode mudar o perfil da densidade de probabilidade ao variar o parâmetro da velocidade angular.

Já para rotações negativas, temos um efeito inverso. A medida que a velocidade angular diminui, o anel sofre um alargamento, de modo que a borda interna se afasta do centro ($x = 0$ e $y = 0$). Para deixar isso mais evidente, plotamos na Fig. 21 dois estados

Figura 20 – Função de distribuição de probabilidade para diferentes rotações



(Cor online) Os valores dos parâmetros utilizados são $\hbar\omega_0 = 25$ meV, $r_0 = 12$ nm, $\phi = 0.5$ h/e e $B = 15$ T. As Figs. (a), (b) e (c) são plotadas para o estado Υ_{00} e as Figs. (d), (e) e (f), para o estado Υ_{21} . Fonte: Elaborado pelo autor.

distintos Υ_{00} e Υ_{21} para diferentes valores negativos da velocidade angulares iguais a 0 THz, -15 THz e -18 THz. A região amarelada com geometria anelar tanto do gráfico na Fig. 20 quanto na Fig. 21 é onde tem a maior probabilidade de encontrar a partícula. Note também que a medida que a velocidade angular varia essa região é afetada em relação centro do anel quântico.

O espectro de energia também sofre efeitos de rotação. Vamos reescrever a Eq. (4.24) mais explicitamente como

$$\mathcal{E}_{nm} = \left(n + \frac{1}{2} \sqrt{(m-l)^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\omega_c^2 + 4\Omega\omega_c + \omega_0^2} - \frac{1}{2} (m-l) \hbar (\omega_c + 2\Omega) - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2. \quad (4.28)$$

para então investigar os efeitos devido a rotação. No caso particular onde a rotação é nula, ou seja, onde temos $\Omega = 0$, obtemos

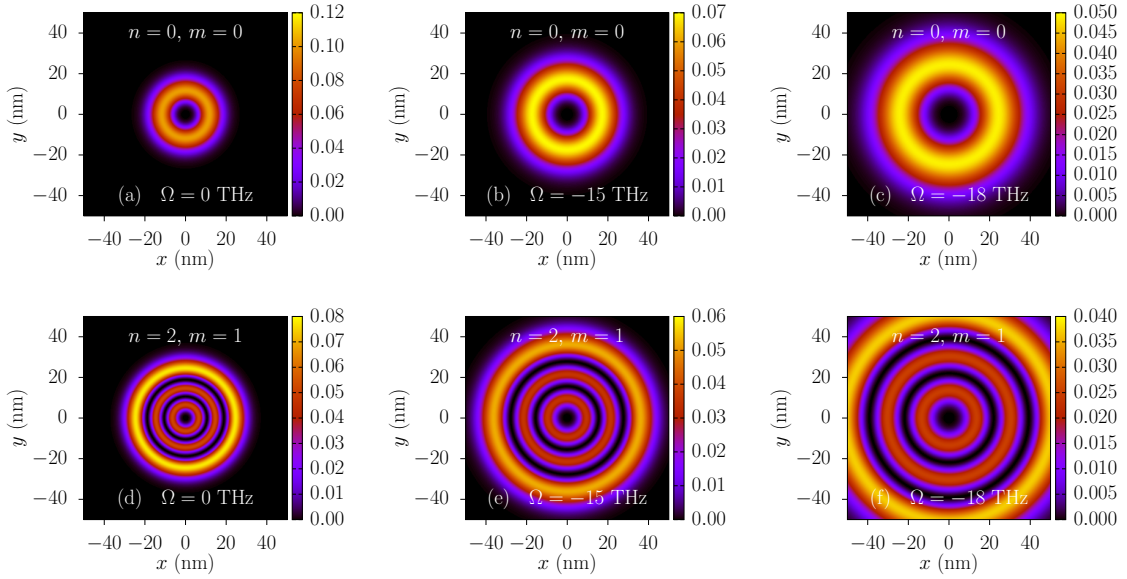
$$\mathcal{E}_{nm} \Rightarrow E_{nm} = \left(n + \frac{1}{2} \sqrt{(m-l)^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\omega_c^2 + \omega_0^2} - \frac{\hbar\omega_c}{2} (m-l) - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2, \quad (4.29)$$

que é o resultado da Eq. (2.77) do Capítulo 2 para o anel quântico sem rotação. Outro caso particular interessante é assumir que $\omega_c = 0$ na Eq. (4.29), que nos leva ao espectro de energia

$$\mathcal{E}'_{nm} = \left(n + \frac{1}{2} \sqrt{(m-l)^2 + \frac{2\mu a_1}{\hbar^2}} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_0 - (m-l) \hbar\Omega - \frac{\mu}{4} \omega_0^2 r_0^2, \quad (4.30)$$

ou seja, essa condição revela que Ω desempenha o papel análogo à ω_c no modelo.

Figura 21 – Função de distribuição de probabilidade para diferentes rotações negativas



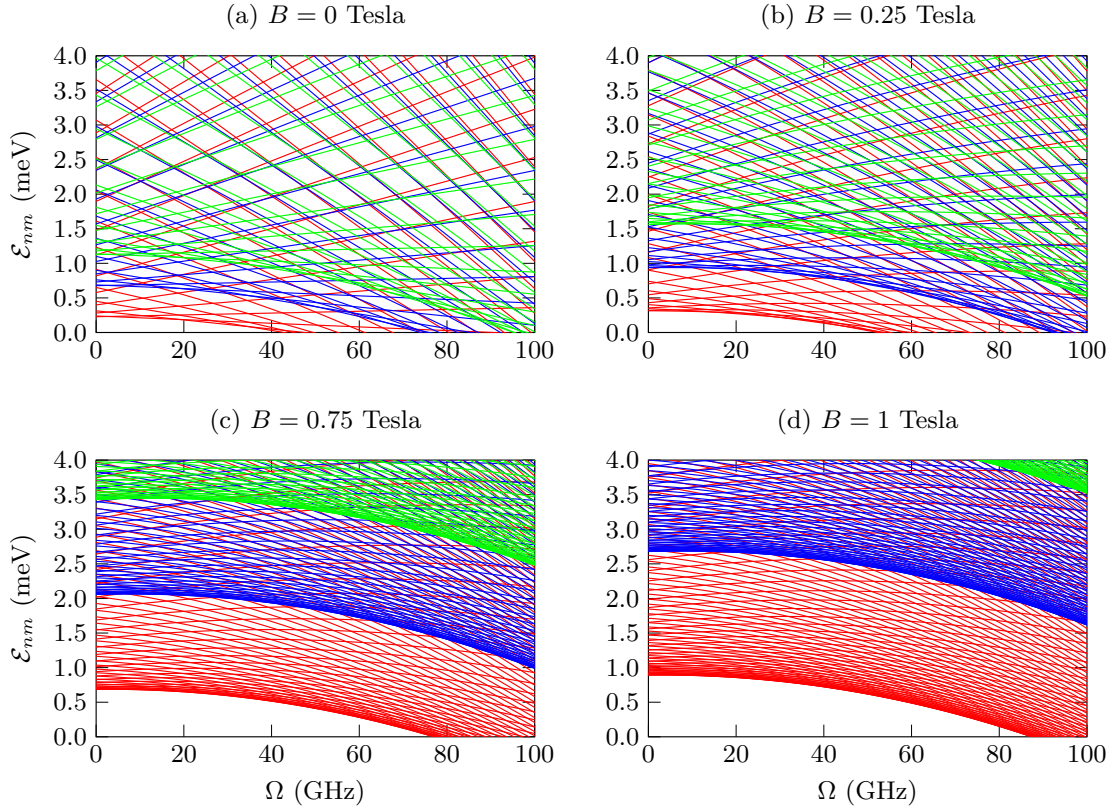
(Cor online) Os valores dos parâmetros utilizados são $\hbar\omega_0 = 25$ meV, $r_0 = 12$ nm, $\phi = 0.5$ h/e e $B = 15$ T. As Figs. (a), (b) e (c) são plotadas para o estado Υ_{00} e as Figs. (d), (e) e (f), para o estado Υ_{21} . Fonte: Elaborado pelo autor.

4.3 Análise dos níveis de energia em anéis quânticos sob efeitos de rotação

A Fig. 22 mostra o comportamento do autovalor de energia em (meV) da Eq. (4.28) para as três sub-bandas mais baixas ($n = 0, 1, 2$) em função da velocidade angular em (GHz)². As curvas de mesma cores representam uma sub-banda indicado pelo número quântico n , cada curva representam um estado diferente de Υ_{nm} para m distinto. Os estados podem ocupar níveis de energia de outra sub-banda, o que fica mais evidente no primeiro gráfico para o valor de campo magnético nulo. Observamos que há uma concentração maior de estados eletrônicos na parte inferior de cada sub-banda, ou seja, a degenerescência é maior, a medida que a energia aumenta essa degenerescência diminui. Para valores superiores de Ω , observamos que a distribuição de estados concentra-se predominantemente em níveis de energia mais baixos. O gráfico da Fig. 22 foi construído para alguns valores de campo magnético fixos, como $B = 0$ Tesla, $B = 0.25$ Tesla, $B = 0.75$ Tesla e $B = 1$ Tesla, visto que o objetivo é analisar os efeitos que a velocidade angular tem sobre os autovalores de energia. Observe que para os valores de campos escolhidos temos que os estados eletrônicos ocupam valores menos energéticos à medida que Ω aumenta. Paralelamente, podemos ver um efeito inverso dos níveis de energia em relação ao campo magnético,

² É uma unidade de medida de frequência equivalente a um bilhão de Hertz, $1 \text{ Hz} = 10^9 \text{ GHz}$. Ao realizar a análise das propriedades eletrônicas nesta seção, foram obtidos resultados mais apropriados ao empregar a unidade de gigahertz (GHz) para os parâmetros selecionados do anel quântico, com $r_0 = 800$ nm e $\hbar\omega_0 = 0.449$ meV.

Figura 22 – Gráfico da Energia em Função da Velocidade Angular para as três sub-bandas mais baixas.

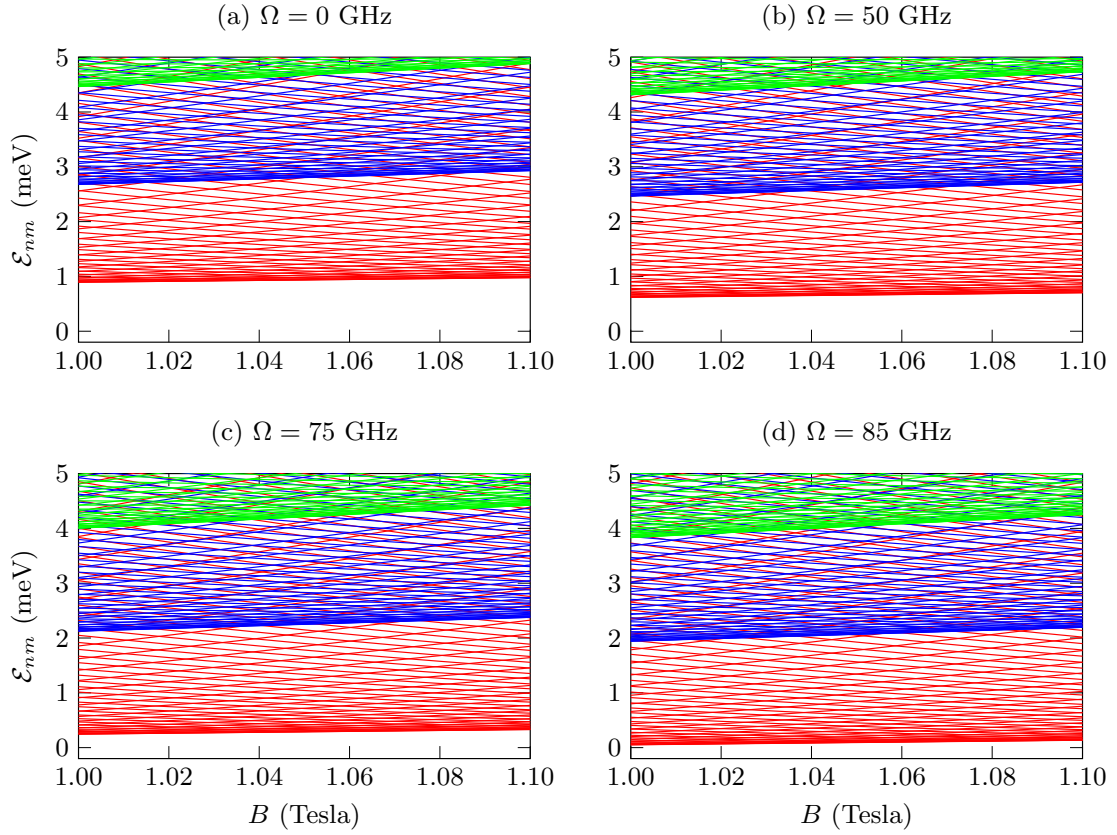


(Cor online) — $n = 0$, $n = 1$, $n = 2$. Os valores dos parâmetros utilizados são os mesmo da Fig. 10. Fonte: Adaptada de [38] para o potencial de Tan-Inkson.

representado pela ocupação predominante dessas concentrações de estados em níveis de energia mais altos diante de pequenas variações nos valores do campo magnético. Conforme ilustrado na Fig. 23, observa-se que a parte inferior das sub-bandas, onde há uma maior concentração de estados eletrônicos, se desloca para valores energéticos mais elevados à medida que B aumenta, enquanto se desloca para valores de energia mais baixos à medida que Ω aumenta.

Cada gráfico na Fig. 23 foi construído assumindo um parâmetro de rotação fixo, visto que, neste caso, estamos interessados em estudar como os estados eletrônicos evoluem em função do campo magnético. Estas duas configurações mostram que um dos efeitos da rotação é a remoção da degenerescência na parte interior de cada sub-banda [38].

Figura 23 – Gráfico da Energia em Função do Campo Magnético.



(Cor online) — $n = 0$, — $n = 1$, — $n = 2$. Os valores dos parâmetros utilizados são os mesmo da Fig. 10. Fonte: Adaptada de [38] para o potencial de Tan-Inkson.

5 SEÇÃO DE CHOQUE DE FOTOIONIZAÇÃO NO MODELO DE ANEL QUÂNTICO 2D SOB EFEITO DE ROTAÇÃO

Neste capítulo, estamos interessados em investigar os efeitos da rotação na SCF para anel quântico 2D. Utilizamos os resultados obtidos do Capítulo 4 para uma amostra de uma heteroestrutura semicondutora de GaAs. A seção de choque de fotoionização sob efeitos de rotação é calculada usando a relação

$$\sigma(\hbar\omega) = C_{n_r} \hbar\omega \left| \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \Upsilon_{nm}^{(f)*}(\rho, \varphi) \Upsilon_{nm}^{(i)}(\rho, \varphi) \rho^2 \cos \theta d\rho d\varphi \right|^2 \times \delta(\mathcal{E}_{nm}^{(f)} - \mathcal{E}_{nm}^{(i)} - \hbar\omega). \quad (5.1)$$

Do mesmo modo como feito na Eq. (3.4), a função $\delta(\mathcal{E}_{nm}^{(f)} - \mathcal{E}_{nm}^{(i)} - \hbar\omega)$ é substituído pela nova Lorentziana que englobará informações sobre a rotação no espectro de energia como

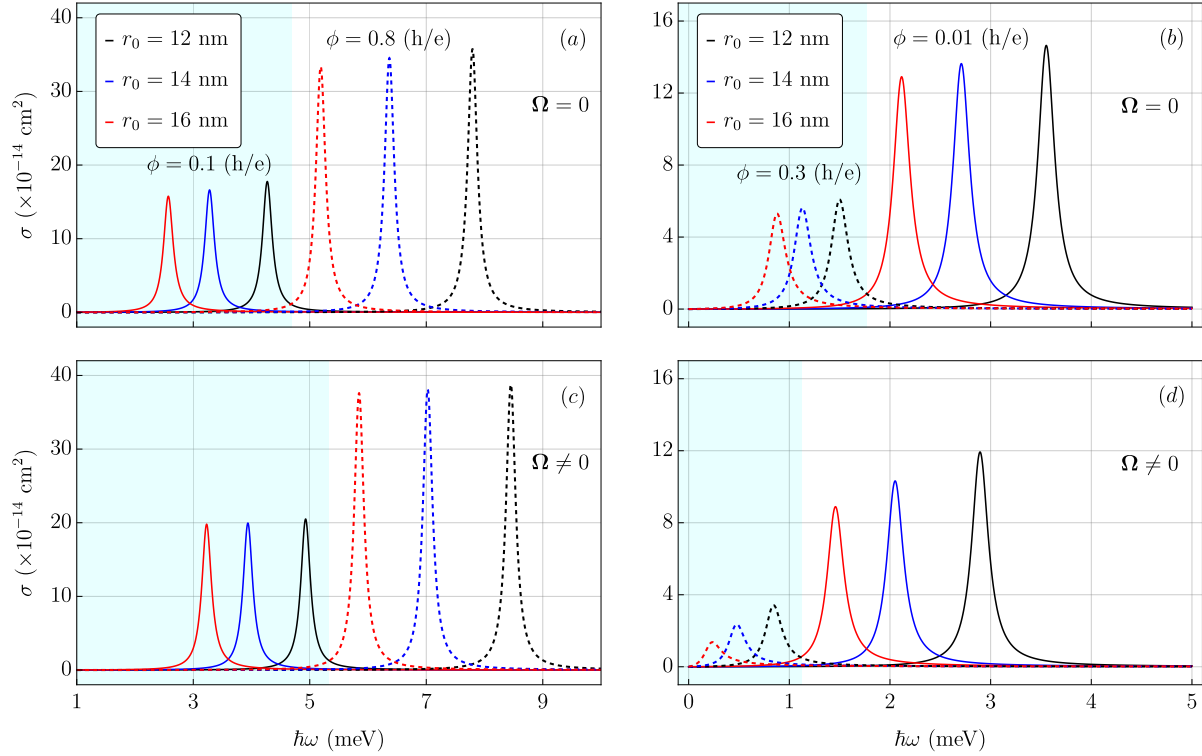
$$\delta(\mathcal{E}_{nm}^{(f)} - \mathcal{E}_{nm}^{(i)} - \hbar\omega) \longrightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\hbar\Gamma_f}{(\mathcal{E}_{nm}^{(f)} - \mathcal{E}_{nm}^{(i)} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_f)^2}, \quad (5.2)$$

onde a função de onda $\Upsilon_{nm}(\rho, \varphi)$ e o espectro de energia $\mathcal{E}_{nm}$ são dados pelas Eqs. (4.27) e (4.28), respectivamente.

A Fig. 24 exibe um conjunto de gráficos representando a SCF em função da energia do fóton incidente para vários valores do raio médio r_0 e considerando as mesmas transições ópticas estudadas no Capítulo 3 seguindo a regra de seleção. Os gráficos são organizados em linhas e colunas: a primeira linha corresponde a $\Omega = 0$, sem efeitos de rotação (Figs. 24(a)–(b)), e a segunda linha corresponde $\Omega = 1$ THz, sob efeitos da rotação (Figs. 24(c)–(d)). As Figs. 24(a) e 24(c) representam a transição $\Upsilon_{00} \longrightarrow \Upsilon_{0-1}$, enquanto 24(b) e 24(d) representam a transição $\Upsilon_{00} \longrightarrow \Upsilon_{01}$. A região azulada com curvas sólidas corresponde a um valor fixo do quantum de fluxo magnético, $\phi = 0.1$ (h/e) para a primeira transição e $\phi = 0.3$ (h/e) para a segunda transição. As curvas tracejadas fora desta região representam o valor do fluxo magnético $\phi = 0.8$ (h/e) para a primeira transição e $\phi = 0.01$ (h/e) para a segunda transição.

Pode-se observar que a amplitude dos picos aumentam de maneira significativa para valores maiores de fluxo de Aharonov-Bohm, o que mostra que ϕ desempenha um papel significativo na SCF. Uma diminuição em r_0 corresponde a um aumento na amplitude dos picos da SCF, causando um desvio nos valores dos picos para valores mais energéticos do fótons incidentes. A rotação também desempenha um papel crucial, com a amplitude

Figura 24 – Gráfico da SCF em função da energia do fóton para diferentes valores de raio médio.



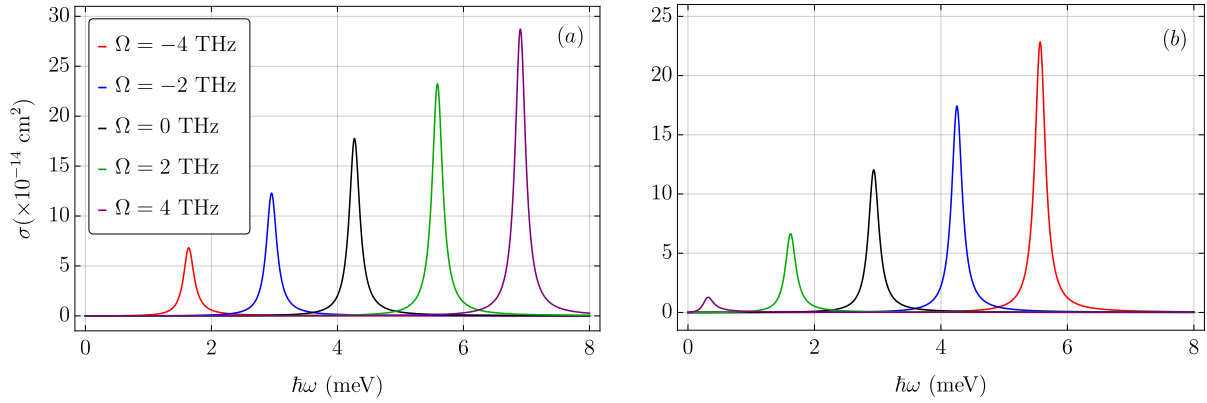
(Cor online) Os valores dos parâmetros utilizados são $\hbar\omega_0 = 25$ meV, $B = 1$ T, $\hbar\Gamma_f = 0.1$ meV, $n_r = 3.15$ e $\epsilon = 13.1$. Os gráficos representam as transições $\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{0-1}$ para a primeira coluna e $\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{01}$ para a segunda coluna, onde os dois gráficos da primeira linha (a) e (b) correspondem a $\Omega = 0$ e o dois últimos (c) e (d) correspondem a $\Omega = 1$ THz. Fonte: Elaborada pelo autor.

do SCF aumentando quando a rotação está presente: os picos na Fig. 24(a) são menores que os da Fig. 24(c), em contraste como os da Fig. 24(b) em relação aos da Fig. 24(d). Estas observações enfatizam a influência significativa do fluxo magnético e da rotação na probabilidade da transição óptica do estado do anel quântico.

A Fig. 25 apresenta a SCF para as duas transições ópticas em função da energia do fóton incidente conforme o parâmetro de rotação varia, abrangendo valores negativos. A primeira transição, $\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{0-1}$ é mostrada na Fig. 25(a), a qual demonstra um aumento na amplitude com a rotação. Além disso, há uma mudança notável na posição do pico em direção a valores mais elevados de energia do fóton. Como esperado, o efeito da rotação na segunda transição, $\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{01}$ na Fig. 25(b) é o oposto. A amplitude diminui com a rotação e há uma mudança na posição do pico para valores mais baixos de energia do fóton. Consequentemente, observamos que as curvas SCF para a segunda transição são mais compactas e posicionadas mais próximas da origem.

Na Fig. 26, seção de choque de fotoionização é plotada em função da velocidade angular para as duas transições, considerando diferentes valores de radiação incidente. As curvas tracejadas se referem a transição $\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{0-1}$, enquanto, as curvas sólidas

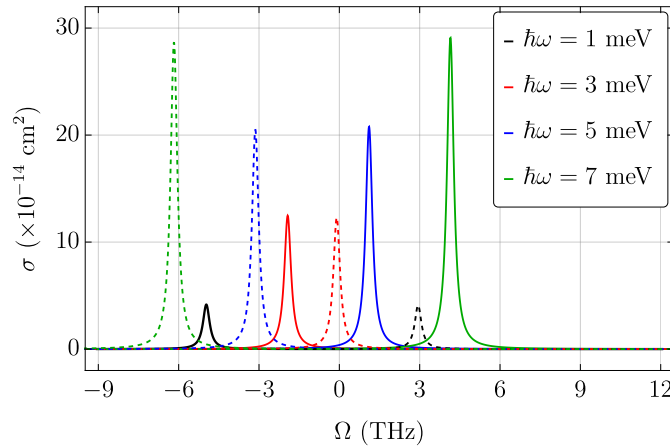
Figura 25 – Gráfico SCF em função da energia do fóton para diferentes valores de velocidade angular.



(Cor online) Os valores dos parâmetros utilizados são $\hbar\omega_0 = 25$ meV, $B = 1$ T, $\hbar\Gamma_f = 0.1$ meV, $n_r = 3.15$ e $\epsilon = 13.1$. Os gráficos representam as transições (a) $\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{0-1}$ para a primeira coluna e (b) $\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{01}$. Fonte: Elaborada pelo autor.

são para $\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{01}$. É possível notar que a medida que a velocidade angular aumenta, a probabilidade da a transição ocorrer aumenta para valores mais energéticos do fóton incidente, consequentemente, aumentando os valores dos picos para a primeira transição. Já para a segunda transição, o que se observa é um efeito contrário, à medida que a velocidade angular diminui temos probabilidades maiores a valores mais energéticos do fóton incidente na transição óptica. Os perfis da SCF observados aqui revela que a primeira transição

Figura 26 – Gráfico SCF em função da energia da velocidade angular para diferentes valores de energia do fóton incidente.



(Cor online) Os valores dos parâmetros utilizados são $\hbar\omega_0 = 25$ meV, $r_0 = 12$ nm, $B = 1$ (T) e $\phi = 0.1$ h/e. No gráfico, as curvas sólidas (—) representam a transição $\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{0-1}$, e as tracejadas (---), $\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{01}$. Fonte: Elaborada pelo autor.

$\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{0-1}$ apresenta maior probabilidade de realizar o processo de fotoionização em comparação com a segunda transição $\Upsilon_{00} \rightarrow \Upsilon_{01}$. As amplitude dos picos da SCF para a primeira transição são maiores que os da segunda transição. Além disso, à medida que aumentamos a magnitude do fluxo de Aharonov-Bohm e do parâmetro de rotação, os

picos da SCF também aumentam. Além disso, a energia do fóton incidente aumenta com a consideração desses dois parâmetros, levando a uma gama maior de possibilidades de liberação do elétron ligado.

6 CONCLUSÕES

Nesta dissertação, exploramos diversos aspectos das propriedades eletrônicas e ópticas para sistemas de baixas dimensionalidade para um anel quântico semiconductor na ausência e sob efeitos de rotação, modelado teoricamente pelo potencial de confinamento de Tan-Inkson na presença de campo magnético e um tubo de fluxo passando pelo centro do anel. O principal foco da pesquisa está na análise dos perfis da seção de choque de fotoionização para as duas transições ópticas mais baixas, buscando compreender seu significado físico.

O estudo destes sistemas mesoscópicos tem grande relevância por suas aplicações no avanço da nanotecnologia e na medicina, principalmente após o prêmio Nobel de química 2023 laurear os pesquisadores pelo desenvolvimento dos pontos quânticos. Tendo em vista essas grandes aplicações dos QDs, estudamos uma estrutura rica e com maior número graus de liberdade para se explorar, como: raio médio, interno e externo, o campo magnético, fluxo Aharonov-Bohm e a velocidade angular para sistemas com rotação em torno de determinado eixo. Estes parâmetros são ajustáveis e sua variação apresenta resultados interessantes para as propriedades eletrônicas e ópticas, além do próprio potencial de confinamento que descreve vários sistemas apenas mudando um dos seus termos.

Faremos um pequeno resumo dos principais resultados obtidos em cada capítulo. Proporemos ainda algumas sugestões e indicações de citações das aplicações da SCF, que podem ser tratadas como prosseguimento natural das investigações aqui feitas.

No Capítulo 2, estudamos as propriedades eletrônicas de um QR 2D, apresentamos o efeito de interferência quântica de Aharonov-Bohm, vimos que o potencial de Tan-Inkson para pequenas oscilações apresenta um comportamento de oscilador harmônico. Partimos do acoplamento mínimo na hamiltoniana para encontrar as autofunções e autovalores de energias de uma partícula sob efeitos do campo magnético no anel quântico.

Na sequência, no Capítulo 3, apresentamos a seção de choque de fotoionização, um ótimo método óptico para estudar as propriedades de estruturas semicondutoras de baixa dimensão. Os resultados demonstrados em relação à energia do fóton incidente e ao fluxo de Aharonov-Bohm para as duas transições ópticas mais baixas revelam diferentes valores quando certos parâmetros do anel são variados, visto que os autovalores de energias dos estados participantes da transição óptica mudam. Os resultados mostraram que o SCF confinado no QR é fortemente dependente dos parâmetros como raio médio e do fluxo de Aharonov-Bohm. Observamos, ainda, que a primeira transição ($n = 0, m = 0$) para ($n = 0, m = 1$) apresenta uma maior probabilidade de realizar o processo de fotoionização em comparação com a segunda transição ($n = 0, m = 0$) a ($n = 0, m = 1$).

No Capítulo 4, introduzimos o sistema de confinamento quântico sob efeito de rotação, o potencial é o mesmo do Capítulo 2, averiguamos que a rotação é responsável pelo deslocamento da densidade de probabilidade de encontrar a partícula no QR, mostrando resultados distintos para a orientação do vetor velocidade angular, conforme a regra da mão direita. A variação da velocidade angular mostrou resultados interessantes nos autovalores de energias, tanto para velocidade angular positiva quanto negativa.

Por fim, no Capítulo 5, investigamos a seção de choque de fotoionização sob efeito de rotação, utilizando os resultados do capítulo anterior. Verificamos que os picos ressonantes da SCF apresentam comportamentos diferentes para velocidades positivas e negativas. Vimos que à medida que aumentamos a magnitude do fluxo magnético e do parâmetro de rotação, os picos do SCF também aumentam. Junto ao Capítulo 3 fechamos um estudo com os principais resultados apresentados para a seção de choque de fotoionização.

O estudo para anéis quânticos (e outros tipos de estruturas mesoscópicas) está sobre a crescente evolução tecnológica de componentes em escala nanométricas, ora, tendo este como um dos principais motivos de investigação e aplicação, como, por exemplo, em dispositivos com estruturas em nanoescala.

Este estudo abre novas perspectivas para investigações futuras nesta área, abrangendo tanto as propriedades eletrônicas quanto ópticas, tais como magnetização, correntes persistentes [35], índice de refração linear, não linear e total [9, 88, 89], juntamente com os coeficientes de absorção óptica. Acrescenta-se a isso a consideração dos efeitos de rotação. Além disso, também proporciona a oportunidade de investigar a seção de choque de fotoionização do QR na presença de impurezas [7, 84, 90], considerando a interação spin-órbita [29, 36, 39, 77] e os efeitos decorrentes da rotação.

Referências

- 1 NETTO, A. L. d. S. **Dinâmica quântica em espaços com defeitos**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2010. 139 f. Tese (Doutorado em Física). Citado 2 vezes nas páginas 14 e 31.
- 2 BAHAR, M. *et al.* Optical properties of a triple algaas/gaas quantum well purported for quantum cascade laser active region. **Materials Today Communications**, Elsevier, v. 26, p. 101936, 2021. Citado na página 14.
- 3 CHEN, B. *et al.* Nonlinear optical rectification in asymmetric double triangular quantum wells. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 66, p. 227–233, 2008. Citado na página 14.
- 4 ENDERS, B. *et al.* Electronic properties of a quasi-two-dimensional electron gas in semiconductor quantum wells under intense laser fields. **Physical Review B**, APS, v. 70, n. 3, p. 035307, 2004. Citado na página 14.
- 5 CANDEMIR, N.; ÖZDEMİR, A. Linear and nonlinear optical properties in a gaas quantum dot with disclination under magnetic field and Aharonov-Bohm flux field. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 492, p. 129226, 2023. Citado na página 14.
- 6 CHUBREI, M.; HOLOVATSKY, V.; DUQUE, C. Effect of magnetic field on donor impurity-related photoionisation cross-section in multilayered quantum dot. **Philosophical Magazine**, Taylor & Francis, v. 101, n. 24, p. 2614–2633, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/14786435.2021.1979267>>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 19.
- 7 PAL, S.; GHOSH, M.; DUQUE, C. Impurity related optical properties in tuned quantum dot/ring systems. **Philosophical Magazine**, Taylor & Francis, v. 99, n. 19, p. 2457–2486, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/14786435.2019.1619949>>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 61.
- 8 PÉREZ, L. M. *et al.* Intense laser field effect on the photo-ionization cross-section of the first exciton transition in a core/shell quantum dot submitted to an applied electric field. **Coatings**, MDPI, v. 13, n. 6, p. 1098, 2023. Citado na página 14.
- 9 LIMA, D. F. *et al.* Optical and electronic properties of a two-dimensional quantum ring under rotating effects. **Annals of Physics**, v. 459, p. 169547, 2023. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491623003494>>. Citado 3 vezes nas páginas 14, 18 e 61.
- 10 XIE, W. Aharonov-Bohm oscillation of photoionization cross section in a quantum ring with a repulsive scattering center. **Physics Letters A**, v. 377, n. 12, p. 903–906, 2013. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960113001461>>. Citado 4 vezes nas páginas 14, 19, 41 e 44.
- 11 JIN, M.; XIE, W.; CHEN, T. Photoionization cross section in a two-dimensional quantum ring with a donor impurity. **Superlattices and Microstructures**, v. 62, p. 59–67, 2013. ISSN 0749-6036. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0749603613002140>>. Citado 4 vezes nas páginas 14, 19, 43 e 44.

- 12 POOLE, C. P.; OWENS, F. J. **Introduction to nanotechnology**. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, 2003. Citado na página 14.
- 13 CHAVES, A. **Confinamento em fios quânticos semicondutores**. 99 p. Dissertação (Mestrado) — Centro de Ciências, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2007. Citado na página 14.
- 14 SCIENCES, T. R. S. A. of. **The Nobel Prize in Chemistry 2023**. The Royal Swedish Academy of Sciences. Disponível em: <<https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2023/press-release/>>. Citado na página 14.
- 15 HEYN, C. *et al.* Exciton states in conical quantum dots under applied electric and magnetic fields. **Optics & Laser Technology**, v. 139, p. 106953, 2021. ISSN 0030-3992. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0030399221000414>>. Citado na página 14.
- 16 CHAKRABORTY, T. Quantum dots: A survey of the properties of artificial atoms. Elsevier, 1999. Citado na página 14.
- 17 MAKSYM, P. A.; CHAKRABORTY, T. Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 65, p. 108–111, Jul 1990. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.65.108>>. Citado na página 14.
- 18 BOSE, C.; SARKAR, C. Effect of a parabolic potential on the impurity binding energy in spherical quantum dots. **Physica B: Condensed Matter**, v. 253, n. 3, p. 238–241, 1998. ISSN 0921-4526. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452698004074>>. Citado na página 14.
- 19 ÇAKIR, B.; YAKAR, Y.; ÖZMEN, A. Refractive index changes and absorption coefficients in a spherical quantum dot with parabolic potential. **Journal of Luminescence**, v. 132, n. 10, p. 2659–2664, 2012. ISSN 0022-2313. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022231312002074>>. Citado na página 14.
- 20 COTTA, M. A. Quantum dots and their applications: What lies ahead? **ACS Applied Nano Materials**, v. 3, n. 6, p. 4920–4924, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acsanm.0c01386>>. Citado na página 14.
- 21 CHISTYAKOV, A. A. *et al.* Optoelectronic properties of semiconductor quantum dot solids for photovoltaic applications. **The Journal of Physical Chemistry Letters**, v. 8, n. 17, p. 4129–4139, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.7b00671>>. Citado na página 14.
- 22 AMETA, R.; BHATT, J.; AMETA, S. **Quantum Dots: Fundamentals, Synthesis and Applications**. Elsevier Science, 2022. ISBN 9780128241530. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=vReQzgEACAAJ>>. Citado na página 14.
- 23 NEAMEN, D. A. **Semiconductor physics and devices**. New York, NY, USA: McGraw-Hill, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 15, 17 e 18.
- 24 ALEMANHA, A. da Indústria de Semicondutores da. **Condutores, isolantes e semicondutores**. 2023. Disponível em: <<https://www.halbleiter.org/en/fundamentals/conductors-insulators-semiconductors/>>. Citado na página 15.

- 25 RESENDE, S. Materiais e dispositivos eletrônicos, editora livraria da física. **São Paulo**, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 17.
- 26 COSTA, D. R. d. **Anéis quânticos semicondutores ideais**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 29.
- 27 FOX, A. M. **Quantum optics: an introduction**. New York, NY, USA: Oxford University Press, 2006. v. 15. Citado na página 16.
- 28 KITTEL, C. **Introdução À Física Do Estado Sólido**. Rio de Janeiro: Grupo Gen-LTC, 2000. Citado na página 17.
- 29 FÖLDI, P. *et al.* Spintronic single-qubit gate based on a quantum ring with spin-orbit interaction. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 71, p. 033309, Jan 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.033309>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 61.
- 30 EINSPRUCH, N. G.; WISSEMAN, W. R. **Gaas microelectronics: Vlsi electronics microstructure science**. Orlando, FL, USA: Academic Press, 2014. Citado na página 17.
- 31 FUHRER, A. *et al.* Energy spectra of quantum rings. **Nature**, v. 413, n. 6858, p. 822–825, oct 2001. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 18.
- 32 OLIVEIRA, R. R. *et al.* Thermodynamic properties of an Aharonov-Bohm quantum ring. **The European Physical Journal Plus**, Springer Berlin Heidelberg, v. 134, n. 10, p. 495, 2019. Citado na página 18.
- 33 KIM, H. *et al.* Light controlled optical Aharonov–Bohm oscillations in a single quantum ring. **Nano Letters**, v. 18, n. 10, p. 6188–6194, 2018. PMID: 30223652. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b02131>>. Citado na página 18.
- 34 LI, L. L. *et al.* Aharonov-Bohm oscillations in phosphorene quantum rings. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 95, p. 205426, May 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.205426>>. Citado na página 18.
- 35 CHAKRABORTY, T.; PIETILÄINEN, P. Persistent currents in a quantum ring: Effects of impurities and interactions. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 52, p. 1932–1935, Jul 1995. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.1932>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 61.
- 36 SMOLKINA, M. O.; POPOV, I. Y.; CHATTERJEE, A. The effect of Rashba spin-orbit interaction on persistent current in a chain of two Holstein-Hubbard rings. **Journal of Physics: Conference Series**, IOP Publishing, v. 1400, n. 7, p. 077011, nov 2019. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/1400/7/077011>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 61.
- 37 SEO, M.; JUNG, H.; CHUNG, Y. Electron interference in a quantum ring with a tunable magnetic field shield. **Applied Science and Convergence Technology**, The Korean Vacuum Society, v. 30, n. 2, p. 62–64, 2021. Citado na página 18.

- 38 PEREIRA, L. F. C.; SILVA, E. O. Modification of Landau levels in a 2d ring due to rotation effects and edge states. **Annalen der Physik**, Wiley, v. 535, n. 6, apr 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002%2Fandp.202200371>>. Citado 4 vezes nas páginas 18, 46, 54 e 55.
- 39 CHOWDHURY, D.; BASU, B. Effect of spin rotation coupling on spin transport. **Annals of Physics**, Elsevier, v. 339, p. 358–370, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 61.
- 40 LORKE, A. *et al.* Spectroscopy of nanoscopic semiconductor rings. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 84, p. 2223–2226, Mar 2000. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.84.2223>>. Citado na página 18.
- 41 CHAKRABORTY, T.; PIETILÄINEN, P. Electron-electron interaction and the persistent current in a quantum ring. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 50, p. 8460–8468, Sep 1994. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.8460>>. Citado na página 18.
- 42 HEITMANN, D. **Quantum Materials, Lateral Semiconductor Nanostructures, Hybrid Systems and Nanocrystals**. Heidelberg, Germany: Springer Science & Business Media, 2010. Citado na página 18.
- 43 AHARONOV, Y.; BOHM, D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 115, p. 485–491, Aug 1959. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.115.485>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 25.
- 44 YU, L.; VOSKOBOYNIKOV, O. Ballistic Aharonov–Bohm quantum bits and quantum gates. **Solid State Communications**, v. 145, n. 9, p. 447–450, 2008. ISSN 0038-1098. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109807008861>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 19.
- 45 XIONG, F.-L.; LAI, H.-L.; ZHANG, W.-M. Generating Majorana qubit coherence in Majorana Aharonov-Bohm interferometer. 2 2021. Citado na página 18.
- 46 WEICHSELBAUM, A.; ULLOA, S. E. Aharonov-Bohm phase as quantum gate in two-electron charge qubits. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 70, p. 195332, Nov 2004. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.70.195332>>. Citado na página 18.
- 47 OVERSTREET, C. *et al.* Observation of a gravitational Aharonov-Bohm effect. **Science**, v. 375, n. 6577, p. 226–229, 2022. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.abl7152>>. Citado na página 19.
- 48 AUDRETSCH, J.; LAMMERZAHN, C. Neutron interference: general theory of the influence of gravity, inertia and space-time torsion. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 16, n. 11, p. 2457, aug 1983. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/16/11/017>>. Citado na página 19.
- 49 CHEN, G.-Y.; CHEN, Y.-N.; CHUU, D.-S. The Aharonov–Bohm effect in concentric quantum double rings. **Solid State Communications**, v. 143, n. 11, p. 515–518, 2007. ISSN 0038-1098. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109807005200>>. Citado na página 19.

- 50 LI, B.; PEETERS, F. M. Tunable optical Aharonov-Bohm effect in a semiconductor quantum ring. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 83, p. 115448, Mar 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.115448>>. Citado na página 19.
- 51 SUÁREZ, F. *et al.* Laser devices with stacked layers of ingaas/gaas quantum rings. **Nanotechnology**, IOP Publishing, v. 15, n. 4, p. S126, 2004. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0957-4484/15/4/003>>. Citado na página 19.
- 52 CAO, H. *et al.* Highly unidirectional InAsInGaAsGaAs quantum-dot ring lasers. **Applied Physics Letters**, v. 86, n. 20, p. 203117, 05 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1931044>>. Citado na página 19.
- 53 ZIPPER, E. *et al.* Flux qubit on a mesoscopic nonsuperconducting ring. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 74, p. 125426, Sep 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.125426>>. Citado na página 19.
- 54 VLADIMIR, M.; FOMIN, A. **Physics of Quantum Rings**. Springer., 2014. Disponível em: <<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-39197-2>>. Citado na página 19.
- 55 GALLARDO, E. *et al.* Single-photon emission by semiconductor quantum rings in a photonic crystal. **J. Opt. Soc. Am. B**, Optica Publishing Group, v. 27, n. 6, p. A21–A24, Jun 2010. Disponível em: <<https://opg.optica.org/josab/abstract.cfm?URI=josab-27-6-A21>>. Citado na página 19.
- 56 SOLAIMANI, M.; MOBINI, A.; KENARI, A. R. Optical absorption engineering in two-dimensional quantum rings: design and optimization for fir to mir detection applications. **Optical and Quantum Electronics**, Springer, v. 54, n. 7, p. 463, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11082-022-03838-x>>. Citado na página 19.
- 57 BARSEGHYAN, M. *et al.* Simultaneous effects of hydrostatic pressure and temperature on donor binding energy and photoionization cross section in pöschl–teller quantum well. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, v. 42, n. 5, p. 1618–1622, 2010. ISSN 1386-9477. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947710000378>>. Citado na página 19.
- 58 LAX, M. Proceedings of the 1954 atlantic city conference on photoconductivity. In: BRECKENRIDGE, R. G.; RUSSELL, B. R.; HAHN, E. E. (Ed.). **Proceedings of the 1954 Atlantic City Conference on Photoconductivity**. New York: Wiley, 1956. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 41.
- 59 BELAID, W. *et al.* A theoretical study of the effects of electric field, hydrostatic pressure, and temperature on photoionization cross-section of a donor impurity in (al, ga)n/aln double triangular quantum wells. **Physica Scripta**, IOP Publishing, v. 98, n. 4, p. 045913, 2023. Citado na página 19.
- 60 BELAID, W. *et al.* A theoretical study of the effects of electric field, hydrostatic pressure, and temperature on photoionization cross-section of a donor impurity in (al, ga)n/aln double triangular quantum wells. **Physica Scripta**, IOP Publishing, v. 98, n. 4, p. 045913, mar 2023. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1402-4896/acc5c0>>. Citado na página 19.

- 61 SALI, A. *et al.* The effect of a strong magnetic field on the binding energy and the photoionization cross-section in a quantum well. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 11, n. 11, p. 2427, mar 1999. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/11/11/013>>. Citado na página 19.
- 62 JAOUANE, M. *et al.* Photoionization cross section of donor single dopant in multilayer quantum dots under pressure and temperature effects. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, Elsevier, v. 144, p. 115450, 2022. Citado na página 19.
- 63 XIE, W. Photoionization cross section in a two-dimensional quantum ring: Aharonov–Bohm effect. **Superlattices and Microstructures**, v. 58, p. 94–100, 2013. ISSN 0749-6036. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S074960361300061X>>. Citado na página 19.
- 64 PEREIRA, C. M. O. *et al.* **Rotating effects on the photoionization cross-section of a 2D quantum ring**. 2024. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2401.14333>>. Citado na página 19.
- 65 RIDLEY, B. K. **Quantum Processes in Semiconductors**. Oxford University Press, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199677214.001.0001>>. Citado 3 vezes nas páginas 22, 23 e 41.
- 66 NOVAES, M.; STUDART, N. **Mecânica quântica básica**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 23, 24 e 29.
- 67 CIFTJA, O. Detailed solution of the problem of Landau states in a symmetric gauge. IOP Publishing, v. 41, n. 3, p. 035404, apr 2020. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1361-6404/ab78a7>>. Citado na página 23.
- 68 SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Mecânica quântica moderna**. Porto Alegre, Brazil: Bookman, 2013. Tradução técnica por Sílvia Renato Dahmen. Citado na página 24.
- 69 GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**. 2^a ed.. ed. São Paulo, Brazil: Pearson Prentice Hall, 2011. Tradução por Lara Freitas; revisão técnica por Marcelo Mulato. Citado 3 vezes nas páginas 26, 27 e 28.
- 70 SOUZA, M. R. d. **Uma abordagem de campos para o efeito Aharonov-Bohm**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Itajubá - UNIFEI, Itajubá, 2019. Citado na página 30.
- 71 TAN, W.-C.; INKSON, J. C. Electron states in a two-dimensional ring - an exactly soluble model. **Semiconductor Science and Technology**, v. 11, n. 11, p. 1635, nov 1996. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0268-1242/11/11/001>>. Citado 5 vezes nas páginas 30, 31, 38, 39 e 40.
- 72 FANG, H. *et al.* Atomically precise vacancy-assembled quantum antidots. **Nature Nanotechnology**, v. 18, p. 1401–1408, 2023. Citado na página 31.
- 73 HAUG, H.; KOCH, S. W. **Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors**. Hackensack, NJ, USA: World Scientific Publishing Company, 2009. Citado na página 32.

- 74 KALT, H.; KLINGSHIRN, C. **Semiconductor Optics**. Boston, USA: Springer, 2019. Citado na página 32.
- 75 LIRA, F. A. G. d. **Estudo sobre os efeitos da massa efetiva anisotrópica nas propriedades eletrônicas, magnetização e corrente persistente em anel quântico semiconductor com geometria cônica**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Maranhão, São Luís, 2021. Citado 4 vezes nas páginas 32, 36, 38 e 39.
- 76 ARFKEN, G. **Mathematical Methods for Physicists**. London: Academic Press, 1970. 636 p. Citado na página 35.
- 77 DINIZ, G. S. **Efeitos de interação spin-órbita em anéis quânticos semicondutores**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 61.
- 78 TSHIPPA, M. Photoionization cross section in a spherical quantum dot: Effects of some parabolic confining electric potentials. **Condensed Matter Physics**, v. 20, p. 23703, 06 2017. Citado na página 41.
- 79 TSHIPPA, M.; SHARMA, L. K.; PRATAP, S. Photoionization cross-section in a gaas spherical quantum shell: the effect of parabolic confining electric potentials. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 94, n. 6, p. 129, 2021. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1140/epjb/s10051-021-00137-4>>. Citado na página 41.
- 80 LAX, M. The Franck-Condon Principle and Its Application to Crystals. **The Journal of Chemical Physics**, v. 20, n. 11, p. 1752–1760, 12 2004. ISSN 0021-9606. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1700283>>. Citado na página 41.
- 81 SAHIN, M. . Photoionization cross section and intersublevel transitions in a one- and two-electron spherical quantum dot with a hydrogenic impurity. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 77, p. 045317, Jan 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.045317>>. Citado na página 41.
- 82 TSHIPPA, M.; SHARMA, L. K.; PRATAP, S. Photoionization cross-section in a gaas spherical quantum shell: the effect of parabolic confining electric potentials. **The European Physical Journal B**, v. 94, n. 6, p. 129, Jun 2021. ISSN 1434-6036. Disponível em: <<https://doi.org/10.1140/epjb/s10051-021-00137-4>>. Citado na página 42.
- 83 PAL, M. G. S.; DUQUE, C. A. Impurity related optical properties in tuned quantum dot/ring systems. **Philosophical Magazine**, Taylor Francis, v. 99, n. 19, p. 2457–2486, 2019. Citado na página 42.
- 84 SAHIN, M. . Photoionization cross section and intersublevel transitions in a one- and two-electron spherical quantum dot with a hydrogenic impurity. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 77, p. 045317, Jan 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.045317>>. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 61.
- 85 RIZZI, G.; RUGGIERO, M. L. **Relativity in rotating frames: relativistic physics in rotating reference frames**. Dordrecht: Springer, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 47.

- 86 PEREIRA, L. F. C.; CUNHA, M. M.; SILVA, E. O. 1D quantum ring: A toy model describing noninertial effects on electronic states, persistent current and magnetization. **Few-Body Systems**, v. 63, n. 3, p. 58, jul 2022. Citado na página 47.
- 87 DANTAS, L.; FURTADO, C.; Silva Netto, A. Quantum ring in a rotating frame in the presence of a topological defect. **Physics Letters A**, v. 379, n. 1, p. 11–15, 2015. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960114010342>>. Citado 2 vezes nas páginas 47 e 49.
- 88 LIANG, S.; XIE, W.; SHEN, H. Optical properties in a two-dimensional quantum ring: Confinement potential and Aharonov–Bohm effect. **Optics Communications**, v. 284, n. 24, p. 5818–5828, 2011. ISSN 0030-4018. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0030401811009783>>. Citado na página 61.
- 89 AGHOUTANE, N. *et al.* Refractive index changes and optical absorption involving 1s–1p excitonic transitions in quantum dot under pressure and temperature effects. **Applied Physics A**, v. 125, n. 1, p. 17, 2018. ISSN 1432-0630. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s00339-018-2306-x>>. Citado na página 61.
- 90 PETER, A. J.; KASAPOGLU, E.; UNGAN, F. Magneto-optical properties of impurity associated photoionization cross-section in laser-driven delta-doped quantum wires. **Physica B: Condensed Matter**, Elsevier, v. 620, p. 413285, 2021. Citado na página 61.
- 91 BASSALO, J. M. F. **Eletrodinâmica Quântica**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 73 e 74.

Apêndices

APÊNDICE A – REGRA DE SELEÇÃO

Neste apêndice faremos o cálculo para selecionar os estados permitidos em uma eventual transição óptica, usando o elemento de matriz do dipolo, partindo da função de onda dada por:

$$\begin{aligned} \psi_{n,m}(\rho, \varphi) = & \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda}} \left[\frac{\Gamma(n+L+1)}{n! (\Gamma(L+1))^2} \right]^{\frac{1}{2}} \\ & \times e^{-im\varphi} e^{-\frac{\rho^2}{4\lambda^2}} \left(\frac{\rho^2}{2\lambda^2} \right)^{\frac{L}{2}} F\left(-n, L+1, \frac{\rho^2}{2\lambda^2}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

A expressão da seção de choque da fotoionização, partindo da regra de ouro de Fermi na conhecida aproximação de dipolo, é dada por

$$\sigma(\hbar\omega) = C_{nr} \hbar\omega \sum_f |\langle \psi_{n,m} | \mathbf{r} | \psi_{n',m'} \rangle|^2 \delta(E_{n,m}^{(f)} - E_{n,m}^{(i)} - \hbar\omega), \quad (\text{A.2})$$

onde

$$\delta(E_{n,m}^{(f)} - E_{n,m}^{(i)} - \hbar\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar\Gamma_f}{(E_{n,m}^{(f)} - E_{n,m}^{(i)} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_f)^2}. \quad (\text{A.3})$$

A quantidade $|\langle \psi_{n,m} | \mathbf{r} | \psi_{n',m'} \rangle|$ é calculada como

$$\begin{aligned} |\langle \psi_{n,m} | \mathbf{r} | \psi_{n',m'} \rangle| = & \frac{1}{2\pi\lambda^2} \left[\frac{\Gamma(n+M+1)}{n! (\Gamma(M+1))^2} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\Gamma(n'+M'+1)}{n'! (\Gamma(M'+1))^2} \right]^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} \\ & \times \cos\varphi \exp\left(-\frac{r^2}{2\lambda^2}\right) \left(\frac{r^2}{2\lambda^2}\right)^{\frac{M+M'}{2}} F\left(-n, M+1, \frac{r^2}{2\lambda^2}\right) F\left(-n', M'+1, \frac{r^2}{2\lambda^2}\right) r^2 dr d\varphi. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

ou na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{if} = & c_{nm} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} \cos\varphi e^{-\frac{r^2}{2\lambda^2}} \left(\frac{r^2}{2\lambda^2}\right)^{\frac{M+M'}{2}} F\left(-n, M+1, \frac{r^2}{2\lambda^2}\right) \\ & \times F\left(-n', M'+1, \frac{r^2}{2\lambda^2}\right) r^2 dr d\varphi \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{if} = & \frac{1}{2\pi\lambda_0^2} \left[\frac{\Gamma(n+M+1)}{n! (\Gamma(M+1))^2} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\Gamma(n'+M'+1)}{n'! (\Gamma(M'+1))^2} \right]^{\frac{1}{2}} \\ & \times \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} F\left(-n, M+1, \frac{r^2}{2\lambda_0^2}\right) \cos\varphi \\ & \times e^{-\frac{r^2}{2\lambda_0^2}} \left(\frac{r^2}{2\lambda_0^2}\right)^\zeta F\left(-n', M'+1, \frac{r^2}{2\lambda_0^2}\right) r^2 dr d\varphi \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

com $\zeta = (M + M')/2$. Definindo a nova variável $z = r^2/2\lambda_0^2$, escrevemos

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{if} = c'_{nm} \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} \cos \varphi d\varphi \int_0^\infty e^{-z} z^{\zeta+\frac{1}{2}} \\ \times {}_1F_1(-n', M' + 1, z) {}_1F_1(-n, M + 1, z) dz, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

onde

$$c'_{nm} = \frac{\lambda_0}{\sqrt{2}} \left[\frac{\Gamma(n' + M' + 1)}{n'! (\Gamma(M' + 1))^2} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\Gamma(n + M + 1)}{n! (\Gamma(M + 1))^2} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.8})$$

Usando a identidade $2 \cos \varphi = e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}$, a integração na coordena φ resulta

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} \cos \varphi d\varphi = \pi (\delta_{m',m-1} + \delta_{m',m+1}). \quad (\text{A.9})$$

Como resultado, obtemos

$$\begin{aligned} |\langle \psi_{n,m} | \mathbf{r} | \psi_{n',m'} \rangle| = c'_{nm} (\delta_{m',m-1} + \delta_{m',m+1}) \int_0^{2\pi} dz e^{-z} \\ \times z^{\zeta+\frac{1}{2}} {}_1F_1(-n', M' + 1, z) {}_1F_1(-n, M + 1, z) dz. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

de modo que valores não nulos são possíveis somente para $m = \pm 1$.

APÊNDICE B – PARTÍCULA EM UM CAMPO MAGNÉTICO

Considerando uma partícula de massa m e eletricamente carregada de carga e , sujeito ao potencial elétrico $\phi(\mathbf{r}, t)$ e potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Investigaremos a configuração do sistema no qual o movimento da partícula é influenciado pelo campo eletromagnético presente. Se a partícula se move com uma velocidade $\mathbf{v}$, a lagrangiana será dado por [91]:

$$L(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + e[\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} - \phi], \quad (\text{B.1})$$

após uma transformada de Legendre, podemos escrever a hamiltonia como

$$H(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L, \quad (\text{B.2})$$

com o momento canônico dado por

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}}, \quad (\text{B.3})$$

ou seja

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + e[\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} - \phi] \right) \\ \mathbf{p} &= m\mathbf{v} + e\mathbf{A}, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

assim, a velocidade da partícula é expressa como

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p} - e\mathbf{A}}{m}, \quad (\text{B.5})$$

de posse desta equação podemos encontrar a hamiltoniana como

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r}, t) &= (m\mathbf{v} + e\mathbf{A}) \cdot \mathbf{v} - \left(\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + e[\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} - \phi] \right) \\ &= m\mathbf{v}^2 + e\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - e\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} + e\phi \\ &= \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + e\phi \\ &= \frac{1}{2}m \left[\frac{\mathbf{p} - e\mathbf{A}}{m} \right]^2 + e\phi \\ H(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\phi, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

de posse da hamiltoniana podemos encontrar a equação de Schrödinger para uma partícula carregada e sem spin, deslocando-se com velocidade $\mathbf{v}$ em um campo eletromagnético. Pela equação de autovalor, teremos

$$\left[\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\phi \right] \psi = i\frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (\text{B.7})$$

onde $\psi = \psi(\mathbf{r}, t)$ é a função de onda. Podemos escrever de maneira mais detalhada, usando a definição do operador momento linear $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$

$$\begin{aligned} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2\psi &= (\mathbf{p}^2 - e\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} - e\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + e^2\mathbf{A}^2)\psi \\ &= -\nabla^2\psi + ie\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) + ie\mathbf{A} \cdot \nabla\psi + e^2\mathbf{A}^2\psi. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Considerando que:

$$\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) = \psi\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla\psi, \quad (\text{B.9})$$

teremos:

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\phi \right] \psi &= \frac{1}{2m} \left(-\nabla^2\psi + ie\psi\nabla \cdot \mathbf{A} + ie\mathbf{A} \cdot \nabla\psi + \right. \\ &\quad \left. ie\mathbf{A} \cdot \nabla\psi + e^2\mathbf{A}^2\psi \right) + e\phi\psi \\ &= i\frac{\partial\psi}{\partial t}. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Adotando o calibre de Lorentz, $\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{\partial\phi}{\partial t} = 0$, e considerando que o potencial escalar é uma função apenas da posição, $\phi = \phi(\mathbf{r})$, resulta que o divergente do potencial vetorial é nulo, $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Com isso, temos:

$$\left[-\frac{1}{2m}\nabla^2 + \frac{ie}{m}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2\mathbf{A}^2}{2m} + e\phi \right] \psi = i\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (\text{B.11})$$

esta expressão representa a equação de Schrödinger para uma partícula carregada no campo eletromagnético [91].

APÊNDICE C – CÁLCULO DA NORMALIZAÇÃO DA FUNÇÃO DE ONDA

A constante de normalização C_n da equação (2.75) deve ser determinada a partir da interpretação estatística de Born da função de onda, na qual diz que a densidade de probabilidade $|\psi(r, \varphi)|^2$ integrada em todo o espaço deve ser igual a 1. A partir do ansatz (2.56) podemos escrever

$$\int \psi^*(r, \varphi) \psi(r, \varphi) r dr d\varphi = 1. \quad (\text{C.1})$$

É indicado normalizar separadamente a parte radial da angular

$$\left(\int B^2 f^*(r) f(r) r dr \right) \left(\int A^2 e^{-im\varphi} e^{im\varphi} d\varphi \right) = 1 \quad (\text{C.2})$$

onde B e A são constantes de normalização para a parte radial e angular, respectivamente, e está relacionada a constante C_n do ansatz (2.56), de tal modo que

$$C_n = B \cdot A, \quad (\text{C.3})$$

a solução para a parte angular é de fácil verificação, já que está relacionada a fase da função de onda

$$\begin{aligned} A^2 \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{im\varphi} d\varphi &= 1, \\ A^2 \int_0^{2\pi} d\varphi &= 1, \\ A^2 2\pi &= 1, \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

deste modo, encontra-se a constante de normalização para a parte angular

$$A = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}. \quad (\text{C.5})$$

Para a parte radial, assim como para a parte angular, devemos integrar em todo o espaço e ser igual a 1, de modo que

$$B^2 \int_0^\infty f^*(r) f(r) r dr = 1, \quad (\text{C.6})$$

fazendo uma mudança de variável no integrando $\xi = \frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2$, de modo que $rdr = \frac{\hbar}{\mu\omega}d\xi$ ou ainda $rdr = \lambda^2 d\xi$, temos

$$\begin{aligned}
B^2 \int_0^\infty f^*(\xi)f(\xi)\lambda^2 d\xi &= 1 \\
\lambda^2 B^2 \int_0^\infty f^*(\xi)f(\xi) d\xi &= 1 \\
\lambda^2 B^2 \int_0^\infty e^{-\xi/2}\xi^{|M|/2} (\zeta(\xi))^* e^{-\xi/2}\xi^{|M|/2}\zeta(\xi) d\xi &= 1 \\
\lambda^2 B^2 \int_0^\infty e^{-\xi}\xi^{|M|} (\zeta(\xi))^* \zeta(\xi) d\xi &= 1 \\
\lambda^2 B^2 \int_0^\infty e^{-\xi}\xi^{|M|} {}_1F_1[-n; |M| + 1; \xi]^2 d\xi &= 1 \\
\lambda^2 B^2 I &= 1,
\end{aligned} \tag{C.7}$$

o trabalho está em terminar o valor da integral

$$I = \int_0^\infty e^{-\xi}\xi^{|M|} \left| {}_1F_1\left[-\left(\gamma - \frac{|M|+1}{2}\right); |M|+1; \xi\right] \right|^2 d\xi. \tag{C.8}$$

Usando as propriedades

$${}_1F_1(-n, \alpha + 1; y) = L_n^\alpha(y) \frac{\alpha!n!}{(\alpha + n)!}, \tag{C.9}$$

e

$$\int_0^\infty y^\alpha e^{-y} L_n^\alpha(y) L_m^\alpha(y) dy = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!} \delta_{nm}, \tag{C.10}$$

comparando $\alpha = |M|$ e $\xi = y$, obtemos o valor da integral (C.8) como

$$\begin{aligned}
I &= \int_0^\infty e^{-y} y^\alpha |F[-n; \alpha + 1; y]|^2 dy, \\
I &= \int_0^\infty e^{-y} y^\alpha \left| L_n^\alpha(y) \frac{\alpha!n!}{(\alpha + n)!} \right|^2 dy, \\
I &= \left(\frac{\alpha!n!}{(\alpha + n)!} \right)^2 \int_0^\infty e^{-y} y^\alpha |L_n^\alpha(y)|^2 dy, \\
I &= \left(\frac{\alpha!n!}{(\alpha + n)!} \right)^2 \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!},
\end{aligned} \tag{C.11}$$

usando a identidade $\Gamma(x + 1) = x!$

$$\begin{aligned}
I &= \left(\frac{\alpha!n!}{(\alpha + n)!} \right)^2 \frac{(n + \alpha)!}{n!}, \\
I &= \frac{(\alpha!)^2 n!}{(\alpha + n)!}, \\
I &= \frac{n! [\Gamma(\alpha + 1)]^2}{(\alpha + n)!},
\end{aligned} \tag{C.12}$$

ou seja

$$I = \frac{n! [\Gamma(|L| + 1)]^2}{(|L| + n)!}, \quad (\text{C.13})$$

finalmente podemos encontrar a constante de normalização em (C.7)

$$\begin{aligned} \lambda^2 B^2 \frac{n! [\Gamma(|M| + 1)]^2}{(|M| + n)!} &= 1, \\ B &= \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{(|M| + n)!}{n! [\Gamma(|M| + 1)]^2}}, \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

Como $C_n = B \cdot C$, temos

$$C_n = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{(|L| + n)!}{2\pi n! [\Gamma(|L| + 1)]^2}}. \quad (\text{C.15})$$

A constante de normalização aqui encontrada é para a função de onda de um anel quântico sem rotação, porém, a mesma serve para os referenciais não inerciais.

APÊNDICE D – ARTIGO RELACIONADO À DISSERTAÇÃO

O artigo, vinculado aos resultados obtidos nesta dissertação, está disponível como uma VERSÃO PRELIMINAR NO ARXIV. <<https://doi.org/10.48550/arXiv.2401.14333>>.

Rotating effects on the photoionization cross-section of a 2D quantum ring

Carlos Magno O. Pereira ^{*}, Frankbelson dos S. Azevedo [†], Luís Fernando C. Pereira [‡] and Edilberto O. Silva [§]
Departamento de Física, Universidade Federal do Maranhão, 65085-580 São Luís, Maranhão, Brazil
 (Dated: January 26, 2024)

In this letter, we investigate the nonrelativistic quantum motion of a charged particle within a rotating frame, taking into account the Aharonov-Bohm (AB) effect and a uniform magnetic field. Our analysis entails the derivation of the equation of motion and the corresponding radial equation to describe the system. Solving the resulting radial equation enables us to determine the eigenvalues and eigenfunctions, providing a clear expression for the energy levels. Furthermore, our numerical analysis highlights the substantial influence of rotation on both energy levels and optical properties. Specifically, we evaluate the photoionization cross-section (PCS) with and without the effects of rotation. To elucidate the impact of rotation on the photoionization process of the system, we present graphics that offer an appealing visualization of the intrinsic nature of the physics involved.

Keywords: Photoionization cross-section, Quantum ring, Rotating effect

Jan 2024