Índice

1 Partícula dentro do ponto quântico - incluindo a segregação

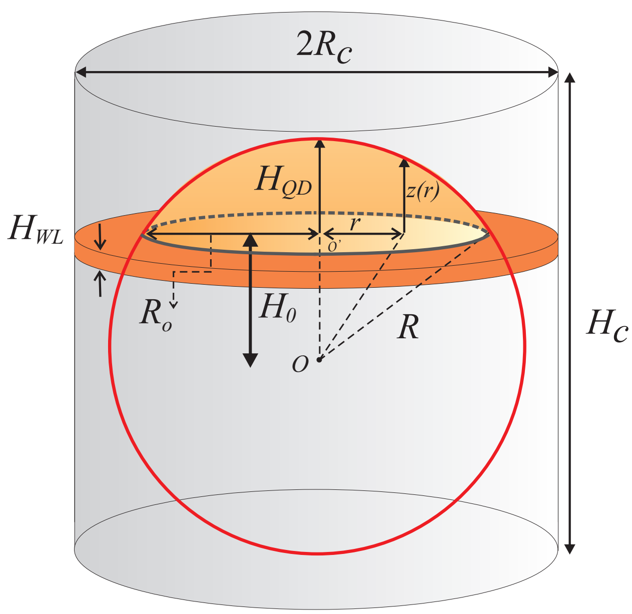

Figura 1: Modelo da arquitetura da estrutura utilizada para o cálculo.

1.1 A equação de Schroedinger

Obtivemos um conjunto infinito de funções mutuamente ortogonais para uma partícula dentro de um cilindro com barreiras infinitas de potencial. Agora, vamos desenvolver a função do elétron confinado no sistema *ponto quântico* (QD)+*wetting layer* (WL) por meio da série:

$$\Psi(r,\theta,z) = \sum_{\ell,m,n} a_{\ell mn}\Psi_{\ell mn}(r,\theta,z) \tag{1}$$

onde

$$\Psi_{\ell mn}(r,\theta,z) = \beta_{mn}J_m(k_{mn}r)\sin\left[\ell\pi\left(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c}\right)\right]e^{im\theta} \tag{2}$$

sendo β_{mn} a constante de normalização de cada autofunção:

$$\beta_{mn} = \sqrt{\frac{2}{H_c\pi\left[R_cJ_{m+1}(k_{mn}R_c)\right]^2}} \tag{3}$$

onde H_c é a altura do cilindro externo e R_c é o raio do cilindro externo. Observe que a condição de contorno utilizada para gerar as funções da base é $J_m(k_{mn}R_c) = 0$ onde R_c é o raio do cilindro que constitui a barreira do sistema formado pelo *ponto quântico* + *wetting-layer* (QD+WL). Além disso, escolhemos o domínio $[-H_c/2, H_c/2]$ e $[0, R_c]$ para as variações em z e r.

Temos agora que resolver a equação de Schroedinger

$$H\Psi = E\Psi, \tag{4}$$

para a Hamiltoniana dada por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2}\nabla M^{-1}\nabla + V(z,r) \tag{5}$$

onde o tensor de massa efetiva M é dado po:

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m^*_{xx}(r,z)} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m^*_{yy}(r,z)} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m^*_{zz}(r,z)} \end{pmatrix} \tag{6}$$

e o gradiente em coordenadas cilíndricas é dado por (veja a página 91 do Arfken):

$$\nabla = \hat{\rho}_0\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r + \hat{\theta}_0\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{k}\frac{\partial}{\partial z} \tag{7}$$

onde $\hat{\rho}_0$, $\hat{\theta}_0$ e $\hat{k}$ formam uma base de versores ortonormais. O potencial é dado por

$$V(r,z) = \begin{cases} -\mathrm{V_{0i}} & \text{na região do poço (QD+WL)} \\ 0 & \text{fora do poço} \end{cases} \tag{8}$$

A região do poço compreende tanto o ponto quântico quanto a wetting-layer. Substituindo a Eq. 1 na Eq. 4, multiplicando-a pela esquerda por $\Psi^*_{l'm'n'}$, e integrando em todo o cilindro, obtemos a equação matricial:

$$(A_{l'm'n'lmn} - E\delta_{mm'}\delta_{nn'}\delta_{ll'}) = 0 \tag{9}$$

onde os elementos de matriz $A_{l'm'n'lmn}$ são dados por:

$$\begin{aligned} A_{l'm'n'lmn} = & -\frac{\hbar^2}{2}\int_{CV+QD+WL}\Psi^*_{\ell'm'n'}[\nabla M^{-1}\nabla]\Psi_{\ell mn}\,dV \\ & + \int_{CV+QD+WL}\Psi^*_{\ell'm'n'}V(r,z)\Psi_{\ell mn}\,dV. \end{aligned} \tag{10}$$

As integrais na expressão 10 devem ser feitas na região que compreende o QD + a região da WL + a região do cilindro que constitui a barreira do sistema. Neste texto denominaremos a região da barreira por cilindro vazado e denotaremos esta região por CV. Observe que a massa efetiva do elétron assume diferentes valores quando o elétron encontra-se na região do cilindro vazado (barreira) ou dentro do ponto quântico ou da WL. Isto significa que o tensor de massa efetiva do elétron depende de z e r, ou seja $M^{-1}(z,r)$. Antes de continuar, vamos escrever os elementos de matriz de uma forma mais conveniente para os cálculos. Vamos integrar por partes o primeiro termo da expressão anterior.

$$\begin{aligned} A_{l'm'n'lmn} = & -\frac{\hbar^2}{2}\left\{\Psi^*_{\ell'm'n'}M^{-1}\nabla\Psi_{\ell mn}\right\}^{r=R_c,\theta=2\pi,z=+H_c/2}_{r=0,\theta=0,z=-H_c/2} \\ & -\frac{\hbar^2}{2}\left\{-\int_{CV+QD+WL}\nabla\Psi^*_{\ell'm'n'}M^{-1}\nabla\Psi_{\ell mn}\,dV\right\} \\ & + \int_{CV+QD+WL}\Psi^*_{\ell'm'n'}V(r,z)\Psi_{\ell mn}\,dV. \end{aligned} \tag{11}$$

O primeiro termo do lado direito da expressão anterior é nulo pois, por construção, as autofunções se anulam quando avaliadas na superfície do cilindro, isto é, em $r = R_c$, e $z = \pm H_c/2$. Então, os elementos de matriz serão calculados como:

$$\begin{aligned} A_{l'm'n'lmn} = & +\frac{\hbar^2}{2}\int_{CV+QD+WL}\nabla\Psi^*_{\ell'm'n'}M^{-1}\nabla\Psi_{\ell mn}\,dV \\ & + \int_{CV+QD+WL}\Psi^*_{\ell'm'n'}V(r,z)\Psi_{\ell mn}\,dV. \end{aligned} \tag{12}$$

Para contornar o problema da descontinuidade da massa efetiva e do potencial nas diferentes regiões do sistema, vamos assumir inicialmente que a massa do elétron é constante em todo o sistema formado pelo cilindro vazado+ponto quântico+WL. Em nossos cálculos vamos assumir que a tensão no material da barreira de GaAs não é significativa. Desta forma, podemos assumir que no GaAs $m^*_{xx} = m^*_{yy} = m^*_{zz} = m^*_B$, e vamos considerar que nas três regiões (CV+QD+WL) a massa efetiva do elétron é a mesma e que seu valor é igual à massa do elétron na barreira, m^*_B. Vamos considerar também que o potencial é nulo em todo o cilindro. Para levar em conta que a massa efetiva muda de valor nas diferentes regiões do sistema, vamos **subtrair** a integral na região do QD+WL onde usamos a massa m_B, e em seguida vamos **adicionar** a integral na região do QD+WL usando as massas adequadas em cada região. O mesmo tipo de truque deve ser feito para corrigir o potencial. Desta forma podemos escrever os elementos de matriz $A_{l'm'n'lmn}$ como:

$$
\begin{aligned}
A_{l'm'n'lmn} = &+ \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\int_{Cilindro} \nabla\Psi^*_{\ell'm'n'}\cdot\nabla\Psi_{\ell mn}\;dV \\
&- \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\int_{QD+WL} \nabla\Psi^*_{\ell'm'n'}\cdot\nabla\Psi_{\ell mn}\;dV \\
&+ \frac{\hbar^2}{2}\int_{QD+WL} \nabla\Psi^*_{\ell'm'n'}M^{-1}\nabla\Psi_{\ell mn}\;dV \\
&+ \int_{QD+WL} \Psi^*_{\ell'm'n'}V(r,z)\Psi_{\ell mn}\;dV.
\end{aligned} \tag{13}
$$

que pode ser reescrita como:[1]

$$
\begin{aligned}
A_{l'm'n'lmn} = &- \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\int_{Cilindro} \Psi^*_{\ell'm'n'}\nabla^2\Psi_{\ell mn}\;dV \\
&- \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\int_{QD+WL} \nabla\Psi^*_{\ell'm'n'}\cdot\nabla\Psi_{\ell mn}\;dV \\
&+ \frac{\hbar^2}{2}\int_{QD+WL} \nabla\Psi^*_{\ell'm'n'}\cdot\left[\frac{1}{m^*_{xx}(r,z)}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial r}\hat{\rho}_0 + \frac{1}{m^*_{yy}(r,z)}\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial\theta}\hat{\theta}_0 + \frac{1}{m^*_{zz}(r,z)}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial z}\hat{k}_0\right]\;dV \\
&+ \int_{QD+WL} \Psi^*_{\ell'm'n'}\left[V(r,z)\right]\Psi_{\ell mn}\;dV
\end{aligned} \tag{14}
$$

ou

$$
\begin{aligned}
A_{l'm'n'lmn} = &- \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\int_{Cilindro} \Psi^*_{\ell'm'n'}\nabla^2\Psi_{\ell mn}\;dV \\
&- \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\int_{QD+WL} \nabla\Psi^*_{\ell'm'n'}\cdot\nabla\Psi_{\ell mn}\;dV \\
&+ \frac{\hbar^2}{2}\int_{QD+WL} \left[\frac{\partial\Psi_{\ell'm'n'}}{\partial r}\hat{\rho}_0 + \frac{1}{r}\frac{\partial\Psi_{\ell'm'n'}}{\partial\theta}\hat{\theta}_0 + \frac{\partial\Psi_{\ell'm'n'}}{\partial z}\hat{k}_0\right] \\
&\cdot\left[\frac{1}{m_{xx}(r,z)}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial r}\hat{\rho}_0 + \frac{1}{m_{yy}(r,z)}\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial\theta}\hat{\theta}_0 + \frac{1}{m_{zz}(r,z)}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial z}\hat{k}_0\right]\;dV \\
&+ \int_{QD+WL} \Psi^*_{\ell'm'n'}\left[V(r,z)\right]\Psi_{\ell mn}\;dV
\end{aligned} \tag{15}
$$

Fazendo o produto escalar na expressão anterior obtemos:[2]

---

[1]Observe a mudança de sinal nas expressões 13 e 14 pois $\int\nabla\Psi^*\cdot\nabla\Psi\;dV = -\int\Psi^*\nabla^2\Psi\;dV$.

[2]Na expressão 15 temos o produto escalar do gradiente das funções de onda $\nabla\Psi^*_{\ell'm'n'}$ e $\nabla\Psi_{\ell mn}$, onde o gradiente em coordenadas cilíndricas é dado por (veja a página 91 do Arfken): $\nabla = \hat{\rho}_0\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r + \hat{\theta}_0\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{k}\frac{\partial}{\partial z}$ onde $\hat{\rho}_0$, $\hat{\theta}_0$ e $\hat{k}$ formam uma base de versores ortonormais.

$$
\begin{aligned}
A_{l'm'n'lmn} =& - \frac{\hbar^2}{2m_B^*} \int_{Cilindro} \Psi^*_{\ell'm'n'} \nabla^2 \Psi_{\ell mn} \; dV \\
& - \frac{\hbar^2}{2m_B^*} \int_{QD+WL} \nabla \Psi^*_{\ell'm'n'} \cdot \nabla \Psi_{\ell mn} \; dV \\
& + \frac{\hbar^2}{2} \int_{QD+WL} \left[\frac{\partial \Psi^*_{\ell'm'n'}}{\partial r} \frac{1}{m^*_{xx}(r,z)} \frac{\partial \Psi_{\ell mn}}{\partial r} + \frac{1}{m^*_{yy}(r,z)} \frac{1}{r^2} \frac{\partial \Psi^*_{\ell'm'n'}}{\partial \theta} \frac{\partial \Psi_{\ell mn}}{\partial \theta} \right. \\
& \left. + \frac{\partial \Psi_{\ell'm'n'}}{\partial z} \frac{1}{m^*_{zz}(r,z)} \frac{\partial \Psi_{\ell mn}}{\partial z} \right] \; dV \\
& + \int_{QD+WL} \Psi^*_{\ell'm'n'} \left[V(r,z) \right] \Psi_{\ell mn} \; dV
\end{aligned} \tag{16}
$$

1.2 Definição dos elementos de matriz

Assumindo que a massa dentro do ponto quântico e dentro da WL não dependa de r e denominando $m_{xx}(z) = m_{yy}(z) = m_1$ e $m_{zz}(z) = m_2$ podemos reescrever a expressão anterior como:

$$
\begin{aligned}
A_{l'm'n'lmn} = & -\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\int_{Cilindro} \Psi^*_{\ell'm'n'}\nabla^2\Psi_{\ell mn}\; dV \\
& -\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\int_{QD+WL} \nabla\Psi^*_{\ell'm'n'}\cdot\nabla\Psi_{\ell mn}\; dV \\
& +\frac{\hbar^2}{2}\int_{QD+WL}\left[\frac{1}{m_1(z)}\frac{\partial\Psi_{\ell'm'n'}}{\partial r}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial r}\right. \\
& \left. +\frac{1}{m_1(z)}\frac{1}{r^2}\frac{\partial\Psi_{\ell'm'n'}}{\partial\theta}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial\theta}+\frac{1}{m_2(z)}\frac{\partial\Psi_{\ell'm'n'}}{\partial z}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial z}\right]\; dV \\
& +\int_{QD+WL}\Psi^*_{\ell'm'n'}\left[V(r,z)\right]\Psi_{\ell mn}\; dV
\end{aligned}
\tag{17}
$$

ou

$$
\begin{aligned}
A_{l'm'n'lmn} = & \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\int_{Cilindro} \Psi^*_{\ell'm'n'}\nabla^2\Psi_{\ell mn}\; dV}_{(I)} \\
& +\frac{\hbar^2}{2}\int_{QD+WL}\left[\left(\frac{1}{m_1(z)}-\frac{1}{m_B^*}\right)\frac{\partial\Psi_{\ell'm'n'}}{\partial r}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial r}+\right. \\
& +\underbrace{\left.\left(\frac{1}{m_1(z)}-\frac{1}{m_B^*}\right)\frac{1}{r^2}\frac{\partial\Psi_{\ell'm'n'}}{\partial\theta}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial\theta}+\left(\frac{1}{m_2(z)}-\frac{1}{m_B^*}\right)\frac{\partial\Psi_{\ell'm'n'}}{\partial z}\frac{\partial\Psi_{\ell mn}}{\partial z}\right]\; dV}_{(II)} \\
& +\underbrace{\int_{QD+WL}\Psi^*_{\ell'm'n'}\left[V(r,z)\right]\Psi_{\ell mn}\; dV}_{(III)}
\end{aligned}
\tag{18}
$$

Vamos agora avaliar cada uma das integrais que aparecem na equação 18.

1.3 Cálculo da primeira integral dos elementos de matriz $A_{l'm'n'lmn}$

$$
(I) = -\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\int_{Cilindro}\Psi^*_{\ell'm'n'}\nabla^2\Psi_{\ell mn}\; dV \tag{19}
$$

A integral na expressão anterior é simplesmente a energia da partícula livre dentro do cilindro com potencial nulo, dada pela expressão **??**. Desta forma teremos:

$$
(I) = +\left[\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\left(\frac{\ell^2\pi^2}{H_c^2}+\frac{\alpha_{mn}^2}{\rho_0^2}\right)\right]\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\delta_{nn'}. \tag{20}
$$

1.4 Cálculo da segunda integral dos elementos de matriz $A_{l'm'n'lmn}$

Vamos dividir a integral II na equação 18 em duas partes:

$$(II) = (i) + (ii) \tag{21}$$

onde

$$(i) = \langle \Psi_{l'm'n'} \left| E_c^z \right| \Psi_{lmn} \rangle = + \int_{QD+WL} \left(\frac{\hbar^2}{2m_2^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*} \right) \frac{\partial \Psi^*_{\ell'm'n'}}{\partial z} \frac{\partial \Psi_{\ell mn}}{\partial z} \; dV \tag{22}$$

$$\begin{aligned}(ii) = \left\langle \Psi_{l'm'n'} \left| E_c^{r,\theta} \right| \Psi_{lmn} \right\rangle = &+ \int_{QD+WL} \left(\frac{\hbar^2}{2m_1^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*} \right) \frac{\partial \Psi^*_{\ell'm'n'}}{\partial r} \frac{\partial \Psi_{\ell mn}}{\partial r} dV \\ &+ \int_{QD+WL} \left(\frac{\hbar^2}{2m_1^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*} \right) \frac{1}{r}\frac{\partial \Psi^*_{\ell'm'n'}}{\partial \theta} \frac{1}{r}\frac{\partial \Psi_{\ell mn}}{\partial \theta} dV\end{aligned} \tag{23}$$

Vamos desenvolver as Eqs. 22 e 23.

1.4.1 Energia cinética na direção z

Substituindo a função de onda (veja a Eq. 2) na Eq. 22 teremos:

$$\begin{aligned}(i) = \langle \Psi_{l'm'n'} \left| E_c^z \right| \Psi_{lmn} \rangle = + \beta^*_{m'n'}\beta_{mn} &\int_{QD+WL} J_{m'}(k_{m'n'}r) J_m(k_{mn}r) \; rdr \\ &\times \int_{QD+WL} \left(\frac{\hbar^2}{2m_2^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*} \right) \frac{\partial}{\partial z} \sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_c})\right] \frac{\partial}{\partial z} \sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_c})\right] \; dz \\ &\times \underbrace{\int_{QD+WL} e^{-im'\theta} e^{im\theta} \; d\theta}_{2\pi}\end{aligned} \tag{24}$$

Devido à integral na variável θ, os elementos de matriz da energia cinética na direção z serão não nulos apenas quando $m' = m$ (veja a Eq. **??**). Então, o elemento de matriz da energia cinética na direção z fica:

$$\begin{aligned}(i) = + \beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'} &\int_{QD+WL} 2\pi rdr \; J_m(k_{mn'}r) J_m(k_{mn}r) \; \times \\ \times &\int_{QD+WL} \left(\frac{\hbar^2}{2m_2^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*} \right) \frac{\partial}{\partial z} \sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_c})\right] \frac{\partial}{\partial z} \sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_c})\right] \; dz\end{aligned} \tag{25}$$

ou

$$\begin{aligned}(i) = + \beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}(\frac{\ell'\pi}{H_c})(\frac{\ell\pi}{H_c}) &\int_{QD+WL} 2\pi rdr \; J_m(k_{mn'}r) J_m(k_{mn}r) \; \times \\ \times &\int_{QD+WL} \left(\frac{\hbar^2}{2m_2^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*} \right) \cos\left[\ell'\pi(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_c})\right] \cos\left[\ell\pi(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_c})\right] \; dz\end{aligned} \tag{26}$$

As integrais na expressão anterior devem ser calculadas em duas diferentes regiões: a região do QD e a região da WL. A partir daqui, devemos fazer considerações sobre a distribuição da concentração de índio dentro de cada região, ou seja, da WL e do ponto quântico para escrever a dependência da massa com a concentração de índio e também definir os limites de integração. Podemos assumir, por exemplo, que a concentração de índio varia linearmente com a concentração ou que ela varia de monocamada para monocamada.

Nesta formulação vamos considerar que a concentração de índio varia de uma monocamada para outra monocamada, mas em uma dada monocamada a concentração é constante. A WL será partida em M monocamadas e a região do QD em N monocamadas, ou seja,

$$M = \frac{D}{\Delta L}, \quad \text{sendo D a espessura da WL} \tag{27}$$

e

$$N = \frac{H_{QD}}{\Delta L}, \quad \text{sendo } H_{QD} \text{ a altura do QD.} \tag{28}$$

Com estas definições a expressão 26 pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
(i) =& +\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}(\frac{\ell'\pi}{H_c})(\frac{\ell\pi}{H_c})\int_0^{R_c} 2\pi r dr\ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r)\times \\
&\times\left\{\sum_{i=1}^{i=M}\left(\frac{\hbar^2}{2m^*_{2i}(z)}-\frac{\hbar^2}{2m^*_B}\right)\underbrace{\int_{H_0-D+(i-1)\Delta L}^{H_0-D+i\Delta L}\cos\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\cos\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\ dz}_{F^{WL}_{\ell'\ell}}\right\}+ \\
&+\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}(\frac{\ell'\pi}{H_c})(\frac{\ell\pi}{H_c})\sum_{j=1}^{j=N}\left\{\int_0^{R_j} 2\pi r dr\ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r)\times\right. \\
&\times\left.\left(\frac{\hbar^2}{2m^*_{2j}(z)}-\frac{\hbar^2}{2m^*_B}\right)\underbrace{\int_{H_0+(j-1)\Delta L}^{H_0+j\Delta L} x\cos\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\cos\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\ dz\right\}}_{F^{QD}_{\ell'\ell}}+
\end{aligned} \tag{29}$$

onde os limites de integração na variável r na região do QD são dados por:

$$R_j = \sqrt{R^2 - [H_0 + j\Delta L]^2} \tag{30}$$

e

$$z(r) = \sqrt{R^2 - r^2} - H_0 \tag{31}$$

onde R é o raio da esfera inserida dentro do cilindro para definir a geometria do ponto quântico (veja a figura 2). **Observe que na equação 29 as massas dependem de z mas podem sair das integrais pois em cada monocamada a massa é constante e os limites de integração são de monocamda em monocamada.**

No lado direito da Eq. 29, a primeira integral em z refere-se à integral na região da WL e a segunda e a terceira integrais em z contém as integrais na região do QD. Nesta expressão, H_c é a altura e R_c é o raio do cilindro que representa a barreira, $m^*_{2i} = m^*_{zz}(i)$ é a massa efetiva do elétron em cada monocamada da WL, $m^*_{2j} = m^*_{zz}(j)$ é a massa efetiva dentro de cada monocamanda do QD, ΔL é a espessura de uma monocamada do material que forma a WL ou o QD (para o InAs, $\Delta L \approx 2.8$ Å). Mostramos na Figura 2, todos os símbolos que aparecem na equação 29 e os limites de integração que serão usados no cálculo das integrais na região da WL e na região do QD.

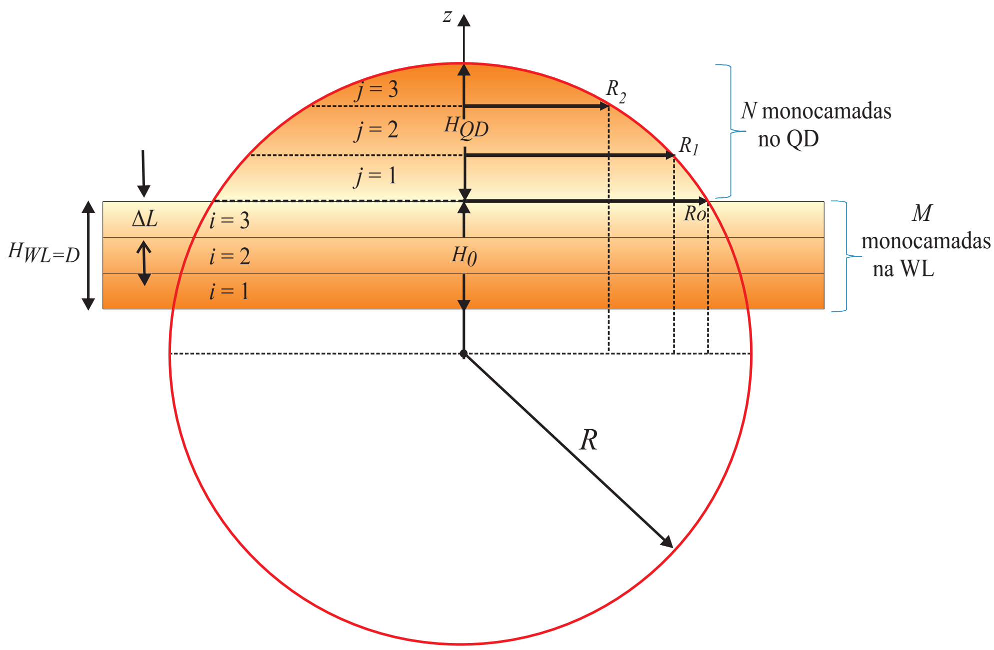

Figura 2: Modelo da arquitetura da estrutura utilizada para o cálculo na região do QD e da WL, mostrando N-monocamadas dentro do QD e M-monocamadas dentro da WL sendo que a espessura de cada monocamada é ΔL.

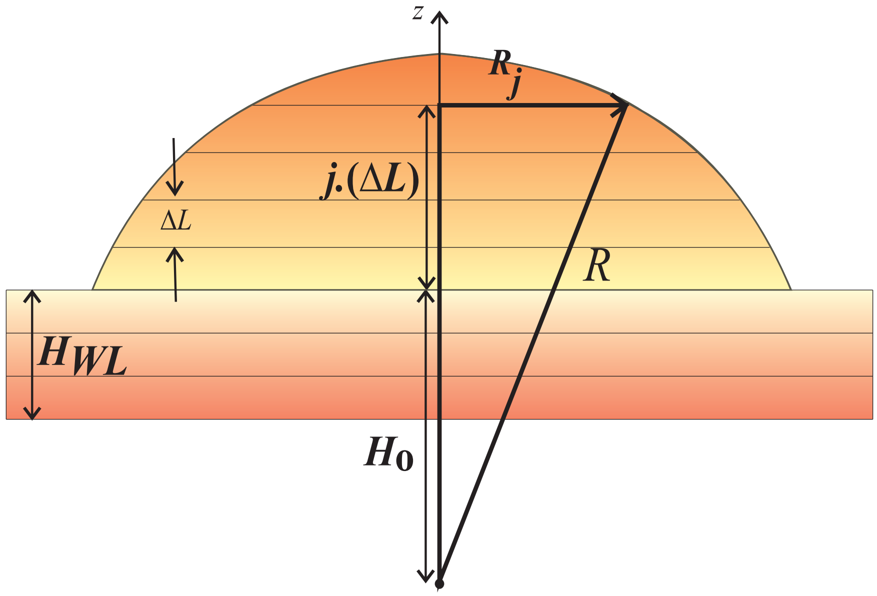

Figura 3: Esquema mostrando o cálculo de R_j da equação 30.

Cálculo das integrais $F^{WL}_{\ell'\ell}$

As integrais $F^{WL}_{\ell'\ell}$ na região da wetting-layer são dadas por:

- para $\ell' \neq \ell$

$$
\begin{aligned}
F^{WL}_{\ell'\ell}(i) = &+\left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'+\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0-D+(i-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'+\ell)\pi} \\
&+\left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'-\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0-D+(i-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'-\ell)\pi} \\
&-\left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'-\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0-D+i\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'-\ell)\pi} \\
&-\left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'+\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0-D+i\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'+\ell)\pi}
\end{aligned}
\tag{32}
$$

- para $\ell' = \ell$

$$
\begin{aligned}
F^{WL}_{\ell\ell}(i) = &\frac{H_c}{4\ell\pi}\sin\left[\pi\ell\left(\frac{H_c-2(H_0-D+(i-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right] \\
&-\frac{H_c}{4\ell\pi}\sin\left[\pi\ell\left(\frac{H_c-2(H_0-D+i\Delta L)}{H_c}\right)\right]+\frac{\Delta L}{2}
\end{aligned}
\tag{33}
$$

As equações 32 e 33 foram conferidas no MATHEMATICA e estão apresentadas no final do texto (Figs. 8 e **??**) para facilitar qualquer checagem.

Cálculo das integrais $F_{\ell'\ell}^{QD}$

Vamos agora calcular a integral $F_{\ell'\ell}^{QD}$. Estas integrais são parecidas com as integrais $F_{\ell'\ell}^{WL}$ da região da WL (eqs. 32 e 33), apenas os limites de integração devem mudar.

- para $\ell' \neq \ell$

$$\begin{aligned} F_{\ell'\ell}^{QD}(j) = &+ \left(\frac{H_c}{2}\right) \frac{\sin\left[\pi(\ell'+\ell)\left(\frac{1}{2} - \frac{(H_0+(j-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'+\ell)\pi} \\ &+ \left(\frac{H_c}{2}\right) \frac{\sin\left[\pi(\ell'-\ell)\left(\frac{1}{2} - \frac{(H_0+(j-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'-\ell)\pi} \\ &- \left(\frac{H_c}{2}\right) \frac{\sin\left[\pi(\ell'-\ell)\left(\frac{1}{2} - \frac{(H_0+j\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'-\ell)\pi}) \\ &- \left(\frac{H_c}{2}\right) \frac{\sin\left[\pi(\ell'+\ell)\left(\frac{1}{2} - \frac{(H_0+j\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'+\ell)\pi} \end{aligned} \tag{34}$$

- para $\ell' = \ell$

$$\begin{aligned} F_{\ell\ell}^{QD}(j) = &\frac{H_c}{4\ell\pi} \sin\left[\pi\ell\left(\frac{H_c - 2(H_0+(j-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right] \\ &- \frac{H_c}{4\ell\pi} \sin\left[\pi\ell\left(\frac{H_c - 2(H_0+j\Delta L)}{H_c}\right)\right] + \frac{\Delta L}{2} \end{aligned} \tag{35}$$

1.4.2 Energia cinética em r e θ

Vamos agora calcular a integral relacionada com a Eq. 23 que pode ser desmembrada em duas partes como:

$$\begin{aligned} (ii) = &+ \left(\frac{\hbar^2}{2m_1^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right) \beta_{m'n'}^* \beta_{mn} \times \int_{QD+WL} \frac{\partial J_{m'}(k_{m'n'}r)}{\partial r} \frac{\partial J_m(k_{mn}r)}{\partial r}\, rdr \;\; \times \\ &\times \int_{QD+WL} \sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_c})\right] \sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_c})\right]\, dz \times \int_{QD+WL} e^{-im'\theta} e^{im\theta}\, d\theta \;\; + \\ &+ \left(\frac{\hbar^2}{2m_1^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right) \beta_{m'n'}^* \beta_{mn} \times \int_{QD+WL} J_{m'}(k_{m'n'}r) J_m(k_{mn}r)\, rdr \;\; \times \\ &\times \int_{QD+WL} \sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_c})\right] \sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_c})\right]\, dz \times \int_{QD+WL} \frac{1}{r}\frac{\partial e^{-im'\theta}}{\partial\theta} \frac{1}{r}\frac{\partial e^{im\theta}}{\partial\theta}\, d\theta \end{aligned} \tag{36}$$

Devido à integral na variável θ, os elementos de matriz serão não nulos apenas quando $m' = m$ (veja a Eq. **??**). Então, o elemento de matriz da energia cinética nas direções r e θ fica:

$$
\begin{aligned}
(ii) = &+\left(\frac{\hbar^2}{2m_1^*(z)}-\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\int_{QD+WL}2\pi\frac{\partial J_m(k_{mn'}r)}{\partial r}\frac{\partial J_m(k_{mn}r)}{\partial r}\,rdr \quad\times\\
&\times\int_{QD+WL}\sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\,dz \quad +\\
&+\left(\frac{\hbar^2}{2m_1^*(z)}-\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}(m)^2\int_{QD+WL}2\pi\frac{J_m(k_{mn'}r)}{r}\frac{J_m(k_{mn}r)}{r}rdr \quad\times\\
&\times\int_{QD+WL}\sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\,dz
\end{aligned}
\tag{37}
$$

Para calcular a segunda integral em r na expressão anterior vamos utilizar a propriedade (pag. 362 do Butkov):

$$
2m\frac{J_m(x)}{x}=J_{m+1}(x)+J_{m-1}(x)
\tag{38}
$$

que nos dá

$$
\frac{J_m(k_{mn'}r)}{r}=\frac{k_{mn'}}{2m}[J_{m+1}(k_{mn'}r)+J_{m-1}(k_{mn'}r)]
\tag{39}
$$

e

$$
\frac{J_m(k_{mn}r)}{r}=\frac{k_{mn}}{2m}[J_{m+1}(k_{mn}r)+J_{m-1}(k_{mn}r)]
\tag{40}
$$

Substituindo as expressões dadas nas eqs. 39 e 40 nos termos coloridos da eq. 37 ficamos com:

$$
\begin{aligned}
(ii) = &+\left(\frac{\hbar^2}{2m_1^*(z)}-\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\int_{QD+WL}2\pi\frac{\partial J_m(k_{mn'}r)}{\partial r}\frac{\partial J_m(k_{mn}r)}{\partial r}\,rdr \quad\times\\
&\times\int_{QD+WL}\sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\,dz \quad +\\
&+\left(\frac{\hbar^2}{2m_1^*(z)}-\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}(m)^2\frac{k_{mn'}}{2m}\frac{k_{mn}}{2m} \quad\times\\
&\times\int_{QD+WL}2\pi[J_{m+1}(k_{mn'}r)+J_{m-1}(k_{mn'}r)][J_{m+1}(k_{mn}r)+J_{m-1}(k_{mn}r)]rdr \quad\times\\
&\times\int_{QD+WL}\sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\,dz
\end{aligned}
\tag{41}
$$

Vamos agora calcular as derivadas das funções de Bessel na primeira integral em r da expressão 41 usando a propriedade (pag. 362 do Butkov):

$$
\frac{dJ_m(x)}{dx}=\frac{[J_{m-1}(x)-J_{m+1}(x)]}{2}
\tag{42}
$$

Usando a expressão anterior e lembrando que $x=k_{mn'}r$ teremos:

$$
\begin{aligned}
\frac{dJ_m(k_{mn'}r)}{dr} &= \frac{dJ(x)}{dx}\frac{dx}{dr}=\frac{k_{mn'}}{2}[J_{m-1}(k_{mn'}r)-J_{m+1}(k_{mn'}r)]\\
\frac{dJ_m(k_{mn}r)}{dr} &= \frac{dJ(x)}{dx}\frac{dx}{dr}=\frac{k_{mn}}{2}[J_{m-1}(k_{mn}r)-J_{m+1}(k_{mn}r)]
\end{aligned}
\tag{43}
$$

Substituindo as expressões dadas em 43 na expressão 41 ficamos com:

$$
\begin{aligned}
(ii) = &+\left(\frac{\hbar^2}{2m_1^*(z)}-\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\frac{k_{mn'}}{2}\frac{k_{mn}}{2} \quad \times \\
&\times\int_{QD+WL} 2\pi[J_{m-1}(k_{mn'}r)-J_{m+1}(k_{mn'}r)][J_{m-1}(k_{mn}r)-J_{m+1}(k_{mn}r)]rdr \quad \times \\
&\times\int_{QD+WL}\sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\,dz \quad + \\
&+\left(\frac{\hbar^2}{2m_1^*(z)}-\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\frac{k_{mn'}}{2}\frac{k_{mn}}{2} \quad \times \\
&\times\int_{QD+WL} 2\pi[J_{m+1}(k_{mn'}r)+J_{m-1}(k_{mn'}r)][J_{m+1}(k_{mn}r)+J_{m-1}(k_{mn}r)]rdr \quad \times \\
&\times\int_{QD+WL}\sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\,dz
\end{aligned}
\tag{44}
$$

Simplificando as expressões anteriores, a eq. 44 reduz-se à:

$$
\begin{aligned}
(ii) = &+\left(\frac{\hbar^2}{2m_1^*(z)}-\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\frac{k_{mn'}}{2}\frac{k_{mn}}{2} \quad \times \\
&\times\int_{QD+WL} 2\left\{[J_{m-1}(k_{mn'}r)J_{m-1}(k_{mn}r)]+[J_{m+1}(k_{mn'}r)J_{m+1}(k_{mn}r)]\right\}2\pi rdr \quad \times \\
&\times\int_{QD+WL}\sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\,dz
\end{aligned}
\tag{45}
$$

As integrais na expressão 45 devem ser feitas na região que compreende o QD + a WL. Com isso a expressão anterior pode ser reescrita como:

$$
\begin{aligned}
(ii) =&+\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\frac{k_{mn'}k_{mn}}{2}\times \\
&\times\int_0^{R_c} 2\pi rdr\ \left\{[J_{m-1}(k_{mn'}r)J_{m-1}(k_{mn}r)]+[J_{m+1}(k_{mn'}r)J_{m+1}(k_{mn}r)]\right\} \quad \times \\
&\times\left(\frac{\hbar^2}{2m_{1i}^*(z)}-\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\sum_{i=1}^{i=M}\underbrace{\int_{H_0-D+(i-1)\Delta L}^{H_0-D+i\Delta L}\sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\,dz}_{G^{WL}_{\ell'\ell}}+ \\
&+\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\frac{k_{mn'}k_{mn}}{2}\times \\
&\sum_{j=1}^{j=N}\left\{\int_0^{R_j} 2\pi rdr\ \left\{[J_{m-1}(k_{mn'}r)J_{m-1}(k_{mn}r)]+[J_{m+1}(k_{mn'}r)J_{m+1}(k_{mn}r)]\right\}\times\right. \\
&\left.\times\left(\frac{\hbar^2}{2m_{1j}^*(z)}-\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\underbrace{\int_{H_0+(j-1)\Delta L}^{H_0+j\Delta L}\sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\,dz}_{G^{QD}_{\ell'\ell}}\right\}
\end{aligned}
\tag{46}
$$

Vamos avaliar as integrais $G^{WL}_{\ell'\ell}$ e $G^{QD}_{\ell'\ell}$. Vamos integrá-las primeiramente na região da WL.

Cálculo das integrais $G_{\ell'\ell}^{WL}$

- para $\ell' \neq \ell$

$$G_{\ell'\ell}^{WL}(i) = -\left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'+\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0-D+(j-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'+\ell)\pi} + \left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'-\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0-D+(j-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'-\ell)\pi} - \left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'-\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0-D+j\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'-\ell)\pi}) + \left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'+\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0-D+j\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'+\ell)\pi} \tag{47}$$

- para $\ell' = \ell$

$$G_{\ell\ell}^{WL}(i) = -\frac{H_c}{4\ell\pi}\sin\left[\pi\ell\left(\frac{H_c-2(H_0-D+(j-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right] + \frac{H_c}{4\ell\pi}\sin\left[\pi\ell\left(\frac{H_c-2(H_0-D+j\Delta L)}{H_c}\right)\right] + \frac{\Delta L}{2} \tag{48}$$

Vamos agora calcular a integral $G_{\ell'\ell}^{QD}$. Observe que nesta integral da região do QD, o limite de integração superior depende, como antes, de r, ou seja, $z = z(r)$. Vamos agora avaliar estas integrais na região do quantum dot.

Cálculo das integrais $G_{\ell'\ell}^{QD}$

- para $\ell' \neq \ell$

$$G_{\ell'\ell}^{QD}(j) = -\left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'+\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0+(j-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'+\ell)\pi} + \left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'-\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0+(j-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'-\ell)\pi} - \left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'-\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0+j\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'-\ell)\pi}) + \left(\frac{H_c}{2}\right)\frac{\sin\left[\pi(\ell'+\ell)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H_0+j\Delta L)}{H_c}\right)\right]}{(\ell'+\ell)\pi} \tag{49}$$

- para $\ell' = \ell$

$$G_{\ell\ell}^{QD}(j) = -\frac{H_c}{4\ell\pi}\sin\left[\pi\ell\left(\frac{H_c-2(H_0+(j-1)\Delta L)}{H_c}\right)\right] + \frac{H_c}{4\ell\pi}\sin\left[\pi\ell\left(\frac{H_c-2(H_0+j\Delta L)}{H_c}\right)\right] + \frac{\Delta L}{2} \tag{50}$$

Portanto, a integral (II) da Eq. 21, que é a soma das integrais (i) (Eq. 29) + (ii) (Eq. 46) está completamente definida.

1.5 Cálculo da terceira integral dos elementos de matriz $A_{lmnl'm'n'}$

$$
\begin{aligned}
(III) = &-\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\int_0^{R_c} 2\pi r dr\ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \quad \times \\
&[V_{oi}(z)] \times \sum_{i=1}^{i=M} \underbrace{\int_{H_0-D+(i-1)\Delta L}^{H_0-D+i\Delta L} \sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\ dz}_{G^{WL}_{\ell'\ell}} + \\
&-\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\sum_{j=1}^{j=N}\left\{\int_0^{R_j} 2\pi r dr\ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \quad \times \right. \\
&\left. [V_{oi}(z)] \times \underbrace{\int_{H_0+(j-1)\Delta L}^{H_0+j\Delta L} [V_{oi}(z)]\sin\left[\ell'\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\sin\left[\ell\pi(\frac{1}{2}-\frac{z}{H_c})\right]\ dz}_{G^{QD}_{\ell'\ell}}\right\} +
\end{aligned}
\tag{51}
$$

Observe que embora o potencial varie em z, as integrais são feitas em cada monocamada, dentro da qual o potencial é constante. Por este motivo, o potencial pode sair de dentro da integral. A expressão anterior ainda pode ser reescrita como:

$$
\begin{aligned}
(III) = &-\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\int_0^{R_c} 2\pi r dr\ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \times \sum_{i=1}^{i=M}[V_{oi}(z)] \times G^{WL}_{\ell'\ell}(i) \\
&-\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\sum_{j=1}^{j=N}\left\{\int_0^{R_j} 2\pi r dr\ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \times [V_{oi}(z)]\ dz \times G^{QD}_{\ell'\ell}(j)\right\}
\end{aligned}
\tag{52}
$$

Observe que na expressão anterior já utilizamos o fato que $V(r,\theta,z) = -V_0$. Portanto, no programa, deve-se dar como dado de entrada apenas o valor do potencial em módulo, isto é, $+V_0$.

1.6 Elementos da matriz $A_{lmnl'm'n'}$

Para escrever os elementos de matriz vamos definir as seguintes constantes:

$$P = +\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}(\frac{\ell'\pi}{H_c})(\frac{\ell\pi}{H_c}) \tag{53}$$

$$Q = +\beta^*_{mn'}\beta_{mn}\delta_{mm'}\frac{k_{mn'}k_{mn}}{2} \tag{54}$$

Com os resultados obtidos nas seções anteriores e definido novas constantes para simplicar a notação podemos escrever os elementos de matriz como:

- $\ell' \neq \ell$

$$
\begin{aligned}
A_{lmnlm'n'} = &+ \left[\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\left(\frac{\ell^2\pi^2}{H_c^2} + \frac{\alpha_{mn}^2}{R_c^2}\right)\right]\delta_{mm'}\delta_{nn'} + \\
&+ P\int_0^{R_c} 2\pi r dr\ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \times \sum_{i=1}^{i=M}\left(\frac{\hbar^2}{2m_{2i}^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\underbrace{F_{\ell'\ell}^{WL}(i)}_{eq32} \\
&+ P\sum_{j=1}^{j=N}\left\{\int_0^{R_j} 2\pi r dr\ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \times \left(\frac{\hbar^2}{2m_{2j}^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\underbrace{F_{\ell'\ell}^{QD}(j)}_{eq34}\right\} \\
&+ Q\int_0^{R_c} 2\pi r dr\ \{[J_{m-1}(k_{mn'}r)J_{m-1}(k_{mn}r)] + [J_{m+1}(k_{mn'}r)J_{m+1}(k_{mn}r)]\} \\
&\times \left(\frac{\hbar^2}{2m_{1i}^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\sum_{i=1}^{i=M}\underbrace{G_{\ell'\ell}^{WL}(i)}_{eq47} \\
&+ Q\sum_{j=1}^{j=N}\left\{\int_0^{R_j} 2\pi r dr\ \{[J_{m-1}(k_{mn'}r)J_{m-1}(k_{mn}r)] + [J_{m+1}(k_{mn'}r)J_{m+1}(k_{mn}r)]\} \times\right. \\
&\left.\times \left(\frac{\hbar^2}{2m_{1j}^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*}\right)\underbrace{G_{\ell'\ell}^{QD}(j)}_{eq49}\right\} \\
&- \beta_{mn'}^*\beta_{mn}\delta_{mm'}\int_0^{R_c} 2\pi r dr\ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \times \sum_{i=1}^{i=M}[V_{oi}(z)] \times \underbrace{G_{\ell'\ell}^{WL}(i)}_{eq47} \\
&- \beta_{mn'}^*\beta_{mn}\delta_{mm'}\sum_{j=1}^{j=N}\left\{\int_0^{R_j} 2\pi r dr\ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \times [V_{oi}(z)]\ dz \times \underbrace{G_{\ell'\ell}^{QD}(j)}_{eq49}\right\}
\end{aligned}
\tag{55}
$$

- $\ell' = \ell$

$$
\begin{aligned}
A_{lmnlm'n'} =& + \left[\frac{\hbar^2}{2m_B^*}\left(\frac{\ell^2\pi^2}{H_c^2} + \frac{\alpha_{mn}^2}{R_c^2}\right)\right]\delta_{mm'}\delta_{nn'} + \\
& + P\int_0^{R_c} 2\pi r dr \ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \times \sum_{i=1}^{i=M}(\frac{\hbar^2}{2m_{2i}^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*})\underbrace{F_{\ell'\ell}^{WL}(i)}_{eq33} \\
& + P\sum_{j=1}^{j=N}\left\{\int_0^{R_j} 2\pi r dr \ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \times (\frac{\hbar^2}{2m_{2j}^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*})\underbrace{F_{\ell'\ell}^{QD}(j)}_{eq35}\right\} \\
& + Q\int_0^{R_c} 2\pi r dr \ \{[J_{m-1}(k_{mn'}r)J_{m-1}(k_{mn}r)] + [J_{m+1}(k_{mn'}r)J_{m+1}(k_{mn}r)]\} \\
& \times (\frac{\hbar^2}{2m_{1i}^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*})\sum_{i=1}^{i=M}\underbrace{G_{\ell'\ell}^{WL}(i)}_{eq48} \\
& + Q\sum_{j=1}^{j=N}\left\{\int_0^{R_j} 2\pi r dr \ \{[J_{m-1}(k_{mn'}r)J_{m-1}(k_{mn}r)] + [J_{m+1}(k_{mn'}r)J_{m+1}(k_{mn}r)]\} \times\right. \\
& \left.\times (\frac{\hbar^2}{2m_{1j}^*(z)} - \frac{\hbar^2}{2m_B^*}) \underbrace{G_{\ell'\ell}^{QD}(j)}_{eq50}\right\} \\
& - \beta_{mn'}^*\beta_{mn}\delta_{mm'}\int_0^{R_c} 2\pi r dr \ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \times \sum_{i=1}^{i=M}[V_{oi}(z)] \times \underbrace{G_{\ell'\ell}^{WL}(i)}_{eq48} \\
& - \beta_{mn'}^*\beta_{mn}\delta_{mm'}\sum_{j=1}^{j=N}\left\{\int_0^{R_j} 2\pi r dr \ J_m(k_{mn'}r)J_m(k_{mn}r) \times [V_{oi}(z)] \ dz \times \underbrace{G_{\ell'\ell}^{QD}(j)}_{eq50}\right\}
\end{aligned}
\tag{56}
$$

2 Ponto quântico tensionado

2.1 Potencial de confinamento na banda de condução

Em um QD tensionado, o potencial de confinamento dos elétrons é escrito como (veja a equação 4.9.5 na página 186 do livro do Chuang):

$$E_c(z) = \begin{cases} a_c(Tr(\epsilon) & \text{na região do poço (QD+WL)} \\ \\ \Delta E_c & \text{fora do poço} \end{cases} \tag{57}$$

onde $Tr(\epsilon) = (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})$. Nesta definição de $E_c(z)$ as energias foram tomadas em relação ao fundo da banda de condução do poço de potencial não tensionado. Para entender a expressão 57, veja a figura 4.

Se tomarmos o fundo da banda de condução do GaAs como referência, podemos escrever que o potencial de confinamento para os elétrons dentro do QD+WL será:

$$V_{0e}(z) = \begin{cases} [\Delta E_c - a_c(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})] & \text{na região do poço (QD+WL)} \\ 0 & \text{fora do poço} \end{cases} \tag{58}$$

As componentes do tensor de tensão (strain) são definidos como (veja a equação 4.5.15 na página 148 do livro do Chuang)[3]:

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_{substrato} - a_{filme}(x)}{a_{filme}(x)} \tag{59}$$

$$\epsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}\epsilon_{xx} \tag{60}$$

onde $a_{substrato}$ é o parâmetro de rede do substrato e $a_{filme}(x)$ é o parâmetro de rede do filme (que depende da composição x se o filme for a liga de InGaAs).

As descontinuidades de gap para a banda de valência e de condução são calculadas por:

$$\begin{aligned} \Delta E_c &= 0.70\Delta E_g(x) \\ \\ \Delta E_v &= 0.30\Delta E_g(x) \end{aligned} \tag{61}$$

onde assuminos um offset de 70% para a banda de condução e 30% para a banda de valência. Estes valores de offset são controversos e pode-se também adotar 60%/40%.

A variação do gap entre os dois mateirias é calculada como:

$$\Delta E_g = E_g^{nt}(substrato) - E_g^{nt}(filme) \tag{62}$$

onde $E_g^{nt}(substrato)$ é a energia do gap do substrato e $E_g^{nt}(filme)$ é a energia do gap do filme AMBOS NÃO TENSIONADOS. Na Tabela 2 mostramos os parâmetros que serão usados para descrever o material puro InAs sobre GaAs (para descrever a regiçai da interface entre a WE e o substrato de GaAs). Fazendo interpolação linear entre os parâmetros de GaAs e InAs obtemos as expressões que nos permite calcular os parâmetros para a liga de $In_xGa_{1-x}As$ sobre GaAs (interface entre a região do QD e o GaAs). Fazendo interpolação linear obtemos as expressões que nos permite calcular os parâmetros para a liga de $In_xGa_{1-x}As$ Na Fig. 5 mostramos a variação de gap $\Delta E_c(x)$

[3] S. L. Chuang, *Physics of optoelectronic devices, (Wiley, New York, 1995)*

fig_tensao1.pdf

Figura 4: Diagrama mostrando o perfil da banda de condução $E_c(z)$ que tem como referência o fundo da banda de condução do poço **não** tensionado, ou seja, as energias são medidas a partir desta referência.

entre o InGaAs/GaAs para T=2,77,300 K e também a varição de potencial por causa da tensão. Podemos observar que para T=2 K e 77 K não há nenhuma variação em $\Delta E_c(x)$. Logo o cálculo dos níveis de confinamento para estas duas temperaturas deve dar os mesmos resultados. Apenas na hora de calcular uma transisão da banda de valência para a banda de condução o valor do gap com a temperatura vai influenciar no resultado final.

Tabela 1: Parâmetros que serão usados no cálculo da tensão para a interface GaAs/InAs.

Parameters	GaAs	InAs
a_0(Å)	5.6533	6.0584
a_c(eV)	-7.17	-5.08
a_v(eV)	1.16	1.00
b(eV)	-1.7	-1.8
$C_{11}(10^{11}\text{dyn/cm}^2)$	12.23	8.33
$C_{12}(10^{11}\text{dyn/cm}^2)$	5.71	4.53

[a]Todos os parâmetros foram retirados da referência C. G. Van de Walle, Phys. Rev. B39, 1871 (1989), exceto os parâmetros de rede. [a]Parâmetros de rede foram tirados de S. L. Chuang, *Physics of Optoelectronic Devices*, pag. 150 (Wiley, New York, 1995.)

2.2 Potenciais de confinamento na banda de valência

Vamos agora calcular o potencial de confinamento para buracos pesados e leves na banda de valência. De acordo com o livro do Chuang (página 187) temos:

$$E_{HH}(z) = \begin{cases} -P_\epsilon - Q_\epsilon & \text{na região do poço (QD+WL)} \\ \\ -\Delta E_v & \text{fora do poço} \end{cases} \tag{63}$$

$$E_{LH}(z) = \begin{cases} -P_\epsilon + Q_\epsilon & \text{na região do poço (QD+WL)} \\ \\ -\Delta E_v & \text{fora do poço} \end{cases} \tag{64}$$

onde

$$P_\epsilon = -a_v(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) \tag{65}$$

$$Q_\epsilon = -\frac{b}{2}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz}) \tag{66}$$

Nestas definições, foi adotado que a referência é o topo da banda de valência do poço não tensionado (veja a figura 7).

De acordo com estas definições, podemos definir o potencial de confinamento para buracos pesados como:

$$V_{HH}(x) = \begin{cases} -\{-\Delta E_v - (-P_\epsilon + Q_\epsilon)\} & \text{na região do poço (QD+WL)} \\ \\ 0 & \text{fora do poço} \end{cases} \tag{67}$$

Tabela 2: Parâmetros que serão usados no cálculo da tensão para a interface GaAs/$In_xGa_{1-x}As$.

Parameters	$In_xGa_{1-x}As$
a_0(Å)	$6.0584x + (1-x)5.6533$
a_c(eV)	$-5.08x - (1-x)7.17$
a_v(eV)	$1.00x + (1-x)1.16$
b(eV)	$-1.8x - (1-x)1.7$
$C_{11}(10^{11}\text{dyn/cm}^2)$	$8.33x + (1-x)12.23$
$C_{12}(10^{11}\text{dyn/cm}^2)$	$4.53x + (1-x)5.71$
$E_g^{nt}(x)(eV)$ para T = 2 K	$1.5192 - 1.5837x + 0.475x^2$
$E_g^{nt}(x)(eV)$ para T = 77 K	$1.508 - 1.47x + 0.375x^2$
$E_g^{nt}(x)(eV)$ para T = 300 K	$1.43 - 1.53x + 0.45x^2$

[a] A interpolação linear entre parâmetros dos materias puros pode ser feita como: a(x)=xa(AC)+(1-x)a(BC). Veja a página 1879 do artigo de C. G. Van de Walle, Phys. Rev. B39, 1871 (1989).

fig_tensao2.pdf

Figura 5: Variação de gap $\Delta E_c(x)$ entre a liga de $In_xGa_{1-x}As$ e o GaAs em função da concetração de In. A curva em preto representa o termo $a_c(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})$, que descreve a mudança no potencial da liga por causa da tensão.

fig_tensao3.pdf

Figura 6: Potencial de confinamento $V_{0e}(x)$ em função da concentração de índio para as temperaturas T=2, 300 K. Estas curvas foram obtidas com a expressão: $V_{0e}(x) = [\Delta E_c - a_c(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})]$ (veja eq. 58 e a fig. 4). Observe que agora o potencial de confinamento para o InAs (x=1) passou de $\approx$ 680 meV (veja a Fig. 5) para $\approx$ 450 meV.

fig_tensao4.pdf

Figura 7: Diagrama mostrando o perfil da banda de valência $E_v(z)$ que tem como referência o fundo da banda de valência do poço **não** tensionado, ou seja, as energias são medidas a partir desta referência.

Integrais na região da WL (eq. 32)

$$\int_{H0-D+(j-1)\times\Delta L}^{H0-D+(j)\times\Delta L} \mathrm{Cos}[a\times ppi\times(0.5-z/Hc)]\times \mathrm{Cos}[b*ppi*(0.5-z/Hc)]\,dz$$

$$\frac{1}{(1.`\,a-1.`\,b)\,(a+b)\,ppi}Hc\Bigg(-1.`\,(-0.5`\,a+0.5`\,b)\,\mathrm{Sin}\left[(a+b)\,ppi\left(0.5`-\frac{1.`\,(-D+H0+(-1+j)\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]+$$

$$(0.5`\,a+0.5`\,b)\,\mathrm{Sin}\left[\frac{ppi\,(0.5`\,a\,Hc-0.5`\,b\,Hc+1.`\,a\,(D-1.`\,H0+\Delta L-1.`\,j\,\Delta L)-1.`\,b\,(D-1.`\,H0+\Delta L-1.`\,j\,\Delta L))}{Hc}\right]+$$

$$(-0.5`\,a-0.5`\,b)\,\mathrm{Sin}\left[\frac{ppi\,(0.5`\,a\,Hc-0.5`\,b\,Hc-1.`\,a\,(-D+H0+j\,\Delta L)+1.`\,b\,(-D+H0+j\,\Delta L))}{Hc}\right]+$$

$$(-0.5`\,a+0.5`\,b)\,\mathrm{Sin}\left[(a+b)\,ppi\left(0.5`-\frac{1.`\,(-D+H0+j\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]\Bigg)$$

$$\frac{1}{(a-b)\,(a+b)\,\pi}Hc\left(\left(\frac{a-b}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[(a+b)\,\pi\left(\frac{1}{2}-\frac{(-D+H0+(j-1)\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]+\left(\frac{a+b}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[\frac{\pi\,(a-b)}{2}+\frac{\pi\,(a-b)\,(D-H0+\Delta L-j\,\Delta L)}{Hc}\right]-\right.$$

$$\left.\left(\frac{a+b}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[\frac{\pi\,(a-b)}{2}-\frac{\pi\,(a-b)\,(-D+H0+j\,\Delta L)}{Hc}\right]-\left(\frac{a-b}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[(a+b)\,\pi\left(\frac{1}{2}-\frac{(-D+H0+j\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]\right)$$

---;

$$\frac{1}{(a-b)\,(a+b)\,\pi}Hc\Bigg(\left(\frac{a-b}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[(a+b)\,\pi\left(\frac{1}{2}-\frac{(-D+H0+(j-1)\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]$$

$$+\left(\frac{a+b}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[\pi\,(a-b)\left(\frac{1}{2}+\frac{(D-H0+\Delta L-j\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]$$

$$-\left(\frac{a+b}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[\pi\,(a-b)\left(\frac{1}{2}-\frac{(-D+H0+j\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]$$

$$-\left(\frac{a-b}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[(a+b)\,\pi\left(\frac{1}{2}-\frac{(-D+H0+j\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]\Bigg)$$

---;

$$1)\;+\frac{1}{(a+b)\,\pi}\left(\frac{Hc}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[\pi\,(a+b)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H0-D+(j-1)\,\Delta L)}{Hc}\right)\right];$$

---;

$$2)\;+\frac{1}{(a-b)\,\pi}\left(\frac{Hc}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[\pi\,(a-b)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H0-D+(j-1)\,\Delta L)}{Hc}\right)\right];$$

---;

$$3)\;-\frac{1}{(a-b)\,\pi}\left(\frac{Hc}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[\pi\,(a-b)\left(\frac{1}{2}-\frac{(H0-D+j\,\Delta L)}{Hc}\right)\right];$$

---;

$$4)\;-\frac{1}{(a+b)\,\pi}\left(\frac{Hc}{2}\right)\mathrm{Sin}\left[(a+b)\,\pi\left(\frac{1}{2}-\frac{(H0-D+j\,\Delta L)}{Hc}\right)\right];$$

---;

Integrais na região da WL (eq. 33)

In[2]:=

$$\int_{H0-D+(j-1)\times\Delta L}^{H0-D+(j)\times\Delta L} \mathrm{Cos}[a\times ppi\times(0.5-z/Hc)]\times \mathrm{Cos}[a*ppi*(0.5-z/Hc)]\,dz$$

Out[2]=

$$0.\,D+0.\,H0+0.\,Hc+0.5\,\Delta L+0.\,j\,\Delta L+\frac{0.25\,Hc\,\mathrm{Sin}\left[a\,ppi\left(1.-\frac{2.\,(-D+H0+(-1+j)\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]}{a\,ppi}-\frac{0.25\,Hc\,\mathrm{Sin}\left[a\,ppi\left(1.-\frac{2.\,(-D+H0+j\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]}{a\,ppi}$$

$$+\frac{1}{2}\Delta L+\frac{Hc\,\mathrm{Sin}\left[a\,\pi\left(1-\frac{2\,(H0-D\,(j-1)\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]}{4\,a\,ppi}-\frac{Hc\,\mathrm{Sin}\left[a\,\pi\left(1-\frac{2\,(H0-D+j\,\Delta L)}{Hc}\right)\right]}{4\,a\,ppi}$$

Figura 8: Equações 32 e 33 obtidas no MATHEMATICA.

Integrais dos senos para a região dos QD (eq. 49)

In[1]:=

$$\int_{H0+(j-1)\times\Delta L}^{H0+(j)\times\Delta L} \mathrm{Sin}[a\times ppi\times(0.5-z/Hc)]\times\mathrm{Sin}[b * ppi * (0.5-z/Hc)]\,dz$$

Out[1]=

$$\frac{1}{(1.\,a-1.\,b)\,(a+b)\,ppi}Hc\Bigg((0.5\,a+0.5\,b)\,\mathrm{Sin}\Big[\frac{ppi\,(0.5\,a\,Hc-0.5\,b\,Hc-1.\,a\,(H0+(-1+j)\,\Delta L)+1.\,b\,(H0+(-1+j)\,\Delta L))}{Hc}\Big]-1.\,(0.5\,a-0.5\,b)\,\mathrm{Sin}\Big[(a+b)\,ppi\,\Big(0.5-\frac{1.\,(H0+(-1+j)\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big]+(-0.5\,a-0.5\,b)\,\mathrm{Sin}\Big[\frac{ppi\,(0.5\,a\,Hc-0.5\,b\,Hc-1.\,a\,(H0+j\,\Delta L)+1.\,b\,(H0+j\,\Delta L))}{Hc}\Big]+(0.5\,a-0.5\,b)\,\mathrm{Sin}\Big[(a+b)\,ppi\,\Big(0.5-\frac{1.\,(H0+j\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big]\Bigg)$$

$$\frac{1}{(a-b)\,(a+b)\,\pi}Hc\Bigg(\Big(\frac{a+b}{2}\Big)\mathrm{Sin}\Big[\pi\,(a-b)\Big(\frac{1}{2}-\frac{\pi\,(H0+(j-1)\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big]-\Big(\frac{a-b}{2}\Big)\mathrm{Sin}\Big[(a+b)\,\pi\Big(\frac{1}{2}-\frac{(H0+(-1+j)\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big]+\Big(\frac{-a-b}{2}\Big)\mathrm{Sin}\Big[\frac{\pi\,(a-b)}{2}+\frac{\pi\,(-a+b)\,(H0+j\,\Delta L)}{Hc}\Big]+\Big(\frac{a-b}{2}\Big)\mathrm{Sin}\Big[(a+b)\,\pi\Big(\frac{1}{2}-\frac{(H0+j\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big]\Bigg);$$

a) $+\frac{1}{(a-b)\,\pi}\Big(\frac{Hc}{2}\Big)\mathrm{Sin}\Big[\pi\,(a-b)\Big(\frac{1}{2}-\frac{\pi\,(H0+(j-1)\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big];$

b) $-\frac{1}{(a+b)\,\pi}\Big(\frac{Hc}{2}\Big)\mathrm{Sin}\Big[(a+b)\,\pi\Big(\frac{1}{2}-\frac{(H0+(j-1)\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big];$

c) $-\frac{1}{(a-b)\,\pi}\Big(\frac{Hc}{2}\Big)\mathrm{Sin}\Big[\pi\,(a-b)\Big(\frac{1}{2}-\frac{\pi\,(H0+j\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big];$

d) $+\frac{1}{(a+b)\,\pi}\Big(\frac{Hc}{2}\Big)\mathrm{Sin}\Big[(a+b)\,\pi\Big(\frac{1}{2}-\frac{(H0+j\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big]$

Integrais dos senos para a região dos QD (eq. 50)

In[1]:=

$$\int_{H0+(j-1)\times\Delta L}^{H0+(j)\times\Delta L} \mathrm{Sin}[a\times ppi\times(0.5-z/Hc)]\times\mathrm{Sin}[a * ppi * (0.5-z/Hc)]\,dz$$

Out[1]=

$$0.\,H0+0.\,Hc+0.5\,\Delta L+0.\,j\,\Delta L-\frac{0.25\,Hc\,\mathrm{Sin}\Big[a\,ppi\Big(1.-\frac{2.\,(H0+(-1+j)\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big]}{a\,ppi}+\frac{0.25\,Hc\,\mathrm{Sin}\Big[a\,ppi\Big(1.-\frac{2.\,(H0+j\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big]}{a\,ppi}$$

$$+\frac{1}{2}\Delta L-\frac{Hc\,\mathrm{Sin}\Big[a\,\pi\Big(1-\frac{2\,(H0+(-1+j)\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big]}{4\,a\,\pi}+\frac{Hc\,\mathrm{Sin}\Big[a\,ppi\Big(1-\frac{2\,(H0+j\,\Delta L)}{Hc}\Big)\Big]}{4\,a\,\pi};$$

Figura 9: Equações 49 obtidas no MATHEMATICA.