



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Anderson Luiz de Jesus

**SISTEMAS QUÂNTICOS COM
INTERAÇÃO SPIN-ÓRBITA E MASSA
EFETIVA DEPENDENTE DA POSIÇÃO**

Volta Redonda

2014

Anderson Luiz de Jesus

**SISTEMAS QUÂNTICOS COM
INTERAÇÃO SPIN-ÓRBITA E MASSA
EFETIVA DEPENDENTE DA POSIÇÃO**

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt

Volta Redonda

2014

J58 Jesus, Anderson Luiz de
Sistemas quânticos com interação spin-órbita e massa
efetiva dependente da posição / Anderson Luiz de Jesus ;
orientador: Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt -- Niterói,
2014.
101 p. : il.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Fluminense,
Instituto de Física, 2014.
Bibliografia: p. 88-90.

1.MECÂNICA QUÂNTICA. 2.EQUAÇÃO DE PAULI. 3.SISTEMA
QUÂNTICO.4.INTERAÇÃO SPIN-ÓRBITA. I. Schmidt, Alexandre Grezzi
de Miranda, Orientador. II.Universidade Federal Fluminense.
Instituto de Física, Instituição responsável. III.Título.

A natureza é um enorme jogo de xadrez disputado por deuses, e que temos o privilégio de observar. As regras do jogo são o que chamamos de Física fundamental, e compreender essas regras é a nossa meta.

Richard P. Feynman

In memoriam meu Pai Nelson Luiz de Jesus

Agradecimentos

Agradeço a Deus por ter guiado os meus passos até aqui.

Agradeço a minha amada esposa Alessandra Máris pelo apoio e pela constante presença nos momentos difíceis e nas incontáveis horas que dediquei a este trabalho.

À minha irmã Tatiana e ao meu cunhado Rafael, que em alguns finais de semana nos receberam calorosamente em sua casa para momentos de descontração e descanso durante períodos de trabalho árduo.

À minha Mãe, aos meus familiares e aos meus amigos mais próximos, à minha amiga Deivieli agradeço pelos muitos anos de amizade.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Alexandre G. Schmidt pelo apoio fundamental em um momento difícil, para que este trabalho pudesse se concretizar, pela paciência, pela confiança depositada, pelos conselhos, pela amizade, pelo rigor e cobrança e também pela oportunidade de trabalhar em uma área de pesquisa tão bela e tão admirada por mim.

Ao Prof. Robson Ancelme de Macedo, por sua importante contribuição e influência na escolha do caminho que me levou a esta profissão e a este trabalho, enfim, a Física, a qual faz parte da minha vida e cuja beleza não consigo mensurar.

Ao Prof. Dr. Adriano S. Martins, pelo apoio desde os primórdios da minha graduação, pela confiança depositada, pelo incentivo de sempre e pela estimada amizade.

Ao Prof. Dr. Rogério M. de Almeida, pela amizade, pela torcida positiva e pelos ensinamentos durante seus inesquecíveis cursos na pós-graduação.

Ao Prof. Dr. Carlos E. Fellows, pelo apoio em um momento difícil, pelos valiosos conselhos, pelos ensinamentos no curso de quântica e pela amizade.

Ao Prof. Dr. Marcos Veríssimo, pela amizade, pelas agradáveis conversas durante o café e pela ajuda em momentos complicados com o Latex.

Ao Prof. Dr. José Oliveira Huguenin, pelo apoio, paciência e pela torcida positiva, desde os primórdios deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Ladário Silva, pelo comprometimento com as atividades do instituto, pela amizade e pela solicitude em diversas oportunidades.

Também agradeço ao Prof. Dr. Licínio Portugal, pelo apoio desde o começo da minha trajetória aqui na UFF e pela amizade.

Agradeço ao colegas de trabalho e de luta Wagner F. Balthazar, Paulo Victor, Jaime e Samuel Domenech, pela amizade, pelos momentos de descontração, pelas conversas animadas, pelas discussões frutíferas e por compartilhar momentos difíceis durante a nossa trajetória no curso.

Agradeço ao amigo Pedro Antônio pelos momentos de descontração e pelas bandejas de costela suína nos finais de semana.

Ao Prof. Dr. Eduardo Pilad, da UERJ, pela gentileza na minha recomendação no início do curso e aos Prof. Dr. Armando e Dr. Luiz V. Belvedere pelo apoio.

Agradeço também ao Prof. Dr. José A. Helayel Neto, do CBPF, pela amizade, incentivo e por sempre estar disposto a ajudar, mesmo à longa distância.

Agradeço a todos os Professores, alunos e funcionários do IF/ICEX-UFF, especialmente àqueles com os quais tive mais contato.

Agradeço ao ex-colega de curso Hélio (in memoriam), pela oportunidade da amizade e pelas agradáveis conversas durante a sua permanência nesta instituição.

Enfim dedico esta dissertação a todas as pessoas que tiveram alguma participação neste trabalho. A todos vocês o meu muito obrigado.

Sumário

| | | |
|----------|---|----------|
| 1 | Introdução | 1 |
| 2 | O Hamiltoniano de von Roos e o problema do Ordenamento | 5 |
| 2.1 | Ordenamento | 5 |
| 2.2 | Hamiltonianos Propostos | 6 |
| 2.3 | Critério de Dutra e Almeida | 7 |
| 3 | Sistemas Quânticos com Interação Spin-Órbita e Massa Efe- tiva constante | 9 |
| 3.1 | Interação Spin-Órbita via Termo de Rashba | 10 |
| 3.2 | Hamiltoniano de Rashba | 12 |
| 3.2.1 | Conservação do Momento Angular | 15 |
| 3.2.2 | Sistema de Equações Acopladas | 20 |
| 3.2.3 | Autofunções | 22 |
| 3.3 | Interação Spin-Órbita via Termo de Dresselhaus | 27 |
| 3.4 | Hamiltoniano de Dresselhaus | 27 |
| 3.4.1 | Conservação do Momento Angular | 29 |
| 3.4.2 | Sistema de Equações Acopladas | 31 |
| 3.4.3 | Autofunções | 33 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 4 | Sistemas Quânticos com Interação Spin-Órbita e Massa Efetiva Dependente da Posição | 38 |
| 4.1 | Introdução | 38 |
| 4.2 | Hamiltoniano de Rashba | 39 |
| 4.2.1 | Conservação do Momento Angular | 45 |
| 4.2.2 | Sistema de Equações Acopladas | 50 |
| 4.2.3 | Autofunções | 51 |
| 4.3 | Hamiltoniano de Dresselhaus | 67 |
| 4.3.1 | Conservação do Momento Angular | 68 |
| 4.3.2 | Sistema de Equações Acopladas | 71 |
| 4.3.3 | Autofunções | 72 |
| 5 | Conclusões e Perspectivas Futuras | 80 |
| 5.1 | Perspectivas Futuras | 81 |
| A | Cálculo de H_{so} para massa constante em coordenadas polares | 83 |
| B | Cálculo dos comutadores $[S_r, L_z]$ e $[S_\theta, L_z]$ | 86 |

Lista de Figuras

- 4.1 Autofunções para $m = 0$. As curvas azul e rosa se referem às componentes superior e inferior, respectivamente, para o caso Rashba. As autofunções de Dresselhaus são invertidas: azul para componente inferior, e rosa para superior. 65
- 4.2 Autofunções para $m = 1$. As curvas azul e rosa se referem às componentes superior e inferior, respectivamente, para o caso Rashba. As autofunções de Dresselhaus são invertidas: azul para componente inferior, e rosa para superior. 66
- 4.3 Autofunções para $m = 2$. As curvas azul e rosa se referem às componentes superior e inferior, respectivamente, para o caso Rashba. As autofunções de Dresselhaus são invertidas: azul para componente inferior, e rosa para superior. 66

Resumo

Neste trabalho estudamos sistemas quânticos com massa dependente da posição em duas dimensões e onde a interação spin-órbita é modelada via termos de Rashba ou de Dresselhaus. No estudo de sistemas com massa dependente da posição um dos problemas em aberto na literatura é o do ordenamento do Hamiltoniano, em outras palavras, o Hamiltoniano pode ser escrito de muitas maneiras e elas não são equivalentes. Para isso diversos testes foram propostos e também sistemas físicos foram modelados com estes Hamiltonianos. Apenas dois deles respeitam as imposições físicas propostas por Dutra e Almeida: os Hamiltonianos de Zhou-Kroemer (ZK) e de Mustafa-Mazharimousavi (MM) [1].

Por outro lado, apesar de terem sido usados em diversas aplicações não se conhecia a forma destes Hamiltonianos para partículas com spin. Nosso objetivo foi construir um Hamiltoniano que levasse em conta a interação spin-órbita — via termos de Rashba e de Dresselhaus separadamente — e estudar o efeito dessa interação. Para esta finalidade estudamos sistemas quânticos em duas dimensões confinados em um poço anelar infinito. A equação de Pauli leva a um sistema de equações diferenciais acopladas que conseguimos resolver por meio de aproximações sucessivas. Apresentamos os autovalores de energia, as autofunções nos dois casos e interpretamos fisicamente as soluções obtidas.

Abstract

In this work we investigate two-dimensional quantum systems with position-dependent mass (PDM) and spin-orbit interaction (SOI) described via Rashba or Dresselhaus terms. One of the key problems of quantum systems with PDM is the so-called ordering problem, i.e., since mass and momentum operator do not commute the Hamiltonian could, in principle, be written in several distinct forms which are non-equivalent. In order to tackle this problem Dutra and Almeida created a test, based on physical considerations, to decide if a given Hamiltonian with a certain ordering is physically allowed or not. Only two Hamiltonians fulfilled this test: the one of Zhou-Kroemer (ZK) and the Mustafa-Mazharimousavi (MM) Hamiltonian.

On the other hand, despite these models were used to study several physical systems, PDM systems with spin were not studied so far. Our objective in this work is to write down a physically allowed Hamiltonian with SOI, modelled via Rashba or Dresselhaus term. In order to investigate the interplay between PDM and SOI we studied analytically the Pauli equation in a two-dimensional circular infinite quantum well. We solve the Pauli equation and presented its eigenfunctions and energy eigenvalues and interpret them physically.

Capítulo 1

Introdução

A dinâmica do movimento de partículas quânticas (elétrons ou buracos) em cristais semicondutores de composição química não-uniforme pode ser modelada em termos de uma estrutura teórica onde a matéria se comporta como se efetivamente a massa dependesse da posição, este modelo foi proposto inicialmente para descrever impurezas em cristais. A teoria da massa efetiva variável tem sido bastante investigada nos últimos tempos e tem ganhado relevante importância no estudo de diversos campos da Física, como a física do estado sólido [2] como no espalhamento em heteroestruturas, o estudo de semicondutores, pontos e anéis quânticos [3, 4, 5, 6, 7], no cálculo de funções de Green [8], na investigação do comportamento de pacotes de onda [9, 10, 11], aplicações em mecânica quântica relativística [12] — lembrando também que uma das maneiras de se estudar a equação de Dirac para uma partícula em um poço infinito [13] é tratar a massa como uma função da posição e no final fazer $m \rightarrow \infty$ — na busca por soluções exatas da equação de Schrödinger [14, 15]; na mecânica clássica um efeito de massa negativa [16] — com a realização experimental — e de um tipo de força de atrito inversa [17] e também na proposta de se criar um efeito de invisibi-

lidade de partículas com massa [18]. A teoria basicamente substitui uma interação potencial complicada por um modelo onde a massa efetivamente dependa da posição, contudo a busca por sistemas onde a massa efetiva não é constante, possui um inconveniente: uma certa ambiguidade do operador Hamiltoniano associado com a parte cinética da partícula surge e tem sido discutida por diversos autores desde os primórdios da teoria. A questão é que aparentemente podemos ter diversos operadores associados com a energia cinética da partícula, e eles não são equivalentes. Oldwig von Roos, em seu artigo [20], trabalhou estes aspectos, apresentando também uma versão generalizada para esses operadores cinéticos e chegou a dois resultados: que o respectivo operador proposto por ele, embora hermitiano, não é um invariante Galileano, isto é, a Física descrita por um observador em um referencial inercial em repouso em relação a uma amostra de composição química não-uniforme não é a mesma física descrita por um observador em um referencial inercial em movimento retilíneo uniforme e não-relativístico com relação a esta mesma amostra. Oldwig von Roos também provou a não-unicidade de seu operador cinético, isto é, este pode representar diferentes sistemas físicos, dependendo do ordenamento utilizado — esta questão dos ordenamentos será tratada com mais detalhes posteriormente —, von Roos confessou no final de seu artigo o possível equívoco em se trabalhar com sistemas de massa efetiva variável e comentou que devêssemos evitá-los, contudo veremos neste trabalho que sistemas com massa efetiva variável oferecem um campo amplo de investigação e rico em resultados tanto teóricos quanto experimentais.

A presente dissertação está organizada da seguinte maneira: No capítulo 2 apresentaremos o problema do ordenamento, que permeia os sistemas quânticos com massa variável e listamos diversas propostas para o Hamiltoniano destes sistemas, devido a vários autores. Voltamos nossa atenção para

os trabalhos de Oldwig von Roos [20] e o seu Hamiltoniano, que se constitui em uma proposta possivelmente adequada para sintetizar as outras em um único objeto matemático, também discutiremos um importante critério devido a Dutra e Almeida [19], que se constitui em um parâmetro orientador para conhecermos qual tipo de ordenamento é fisicamente admissível. No capítulo 3 trataremos de sistemas quânticos com spin $1/2$ e massa efetiva m^* constante, submetidos a uma interação spin-órbita, primeiro via termo de Rashba [21], em seguida via termo de Dresselhaus[22], construiremos o Hamiltoniano para estes termos, verificaremos posteriormente a conservação da componente J_z do momento angular total J e a partir do Hamiltoniano um sistema de equações acopladas, envolvendo somente a parte radial, o qual resolveremos utilizando técnicas especiais e desta forma encontraremos as suas soluções. Este capítulo serve de motivação para o assunto central da dissertação que se encontra no capítulo seguinte, assim, no capítulo 4 trataremos de sistemas quânticos com spin $1/2$ mas com massa dependente da posição radial $\mu(r)$ e submetidos a uma interação spin-órbita (SO) particular. Iniciaremos este capítulo com o tratamento sistemático desses sistemas submetidos primeiro a uma interação SO via termo de Rashba, e em seguida via termo de Dresselhaus, encontraremos, assim como no capítulo anterior, o Hamiltoniano para estes dois termos, em seguida verificaremos a conservação da componente J_z , depois construiremos um sistema de equações acopladas para cada Hamiltoniano que envolverá somente a parte radial e partiremos em seguida para a resolução deste sistema, utilizando aproximações sucessivas, obteremos finalmente a sua solução que tem duas componentes, em seguida faremos o tratamento dessas soluções no sentido de encontrar a densidade radial de probabilidade para estes sistemas e este tratamento será apresentado na forma de gráficos, onde consideraremos três valores do número quântico

angular m . Convém colocar que toda a investigação destes sistemas quânticos (massa constante e variável) será feita em um cenário bidimensional. Convém comentar também que neste trabalho utilizaremos as unidades naturais. Finalmente no capítulo 5 apresentaremos um sumário das conclusões gerais da dissertação, bem como perspectivas para futuras investigações.

Capítulo 2

O Hamiltoniano de von Roos e o problema do Ordenamento

2.1 Ordenamento

A dependência da massa com a posição pode ser modelada em mecânica quântica por meio do Hamiltoniano de von Roos [20],

$$H_0 = -\frac{1}{2} [\mu(x)^\alpha \partial_i \mu(x)^\beta \partial_i \mu(x)^\gamma + \mu(x)^\gamma \partial_i \mu(x)^\beta \partial_i \mu(x)^\alpha], \quad (2.1)$$

onde os parâmetros α, β, γ devem ser reais e satisfazer o vínculo,

$$\alpha + \beta + \gamma = -1. \quad (2.2)$$

Este vínculo é necessário se quisermos recuperar a expressão usual para o Hamiltoniano cinético no limite da massa efetiva constante, este vínculo garante assim que tal expressão seja dimensionalmente correta (dimensão de energia). O Hamiltoniano não é único, pois os operadores momento linear $p_i = -i\hbar\partial_i$ e massa dependente da posição $M(x) = m_0\mu(x)$ não comutam. Diversas questões surgem imediatamente: como escolher os parâmetros

α, β, γ ? Que critérios físicos devemos impor sobre estes parâmetros? Existe maneira de selecionar qual destes Hamiltonianos é realizado na Natureza? Certamente a característica de ter um espectro real, a conservação da corrente de probabilidade e a concordância com resultados experimentais devem servir de guias para respondermos a estas perguntas. No entanto, estas questões ainda não estão todas respondidas e este problema é conhecido como o problema do ordenamento.

Sistemas com massa dependente da posição podem também ser interpretados de outra maneira, i.e., como sendo sistemas de massa constante sujeitos a um potencial externo que depende dos parâmetros α, β, γ , da função $\mu(x)$ e de suas derivadas. Aplicando o operador momento no operador H dado pela equação (2.1) podemos reescreve-lo como,

$$H = -\partial_i \left(\frac{1}{\mu(x)} \right) \partial_i + V_{eff}(x), \quad (2.3)$$

onde o potencial efetivo é dado por,

$$V_{eff}(x) = \frac{(1 + \beta) \mu''(x)}{2 \mu^2(x)} - f(\alpha, \beta) \frac{\mu'(x)^2}{\mu^3(x)} + V(x), \quad (2.4)$$

onde definimos a função $f(\alpha, \beta) = \alpha(\alpha + \beta + 1) + \beta + 1$, e $V(x)$ é o potencial externo. Observe que o potencial efetivo muda de acordo com a escolha da parametrização.

2.2 Hamiltonianos Propostos

Desde o trabalho de von Roos diversos Hamiltonianos foram estudados na literatura e aplicados em problemas de várias áreas da Física. Entre eles estão as parametrizações de Gora e Williams ($\alpha = -1, \beta = \gamma = 0$); de Ben Daniel e Duke ($\alpha = \gamma = 0, \beta = -1$); de Li e Kuhn ($\alpha = 0, \beta = \gamma = -1/2$);

de Zhou e Kroemer ($\alpha = \gamma = -1/2, \beta = 0$); e de Mustafa e Mazharimousavi (MM) ($\alpha = -1/4, \beta = -1/2, \gamma = -1/4$).

Resumimos na tabela abaixo estas parametrizações e os problemas em que elas foram aplicadas,

| Autores | Parâmetros | Aplicado em |
|----------------------|--|-------------------------------------|
| Bastard[23] | $\alpha = \beta = 0, \gamma = -1$ | Estrutura de super-redes |
| Gora e Williams[24] | $\alpha = -1, \beta = \gamma = 0$ | Transporte eletrônico |
| BenDaniel e Duke[25] | $\alpha = \gamma = 0, \beta = -1$ | Tunelamento em semicondutores |
| Li e Kuhn[26] | $\alpha = 0, \beta = \gamma = -1/2$ | Poços quânticos <i>GaAs</i> |
| Zhou e Kroemer[27] | $\alpha = \gamma = -1/2, \beta = 0$ | Condições de contorno em interfaces |
| MM[1] | $\alpha = \gamma = -1/4, \beta = -1/2$ | Ordenamento do Hamiltoniano |

2.3 Critério de Dutra e Almeida

Em um trabalho publicado no ano 2000, Dutra e Almeida [19] partindo do Hamiltoniano de von Roos reescreveram o Hamiltoniano de forma que os parâmetros ficassem todos no potencial, o que implicou em um Hamiltoniano com termos p^2 e com $(\mu'/m^2)p$ somados à contribuições da massa e das suas derivadas. A ambiguidade deixaria de existir se os parâmetros fossem tais que,

$$\alpha + \gamma - a = 0, \quad a - \alpha\gamma - \alpha - \gamma = 0. \quad (2.5)$$

Onde o parâmetro a foi incluído no ordenamento α, β, γ e pode ser ajustado, o Hamiltoniano de von Roos é recuperado quando colocamos $a = 0$. Desta maneira estudando uma certa distribuição de massa Dutra e Almeida reescreveram a equação de Schrödinger com massa dependente da posição para uma partícula como a equação usual, com massa constante, e com potencial externo dado pelo potencial de Morse, que escrevemos apenas por

motivo de completeza [28],

$$V(r) = V_0 [e^{-2(r-r_0)/d} - 2e^{-(r-r_0)/d}],$$

neste estudo Dutra e Almeida investigaram analiticamente o espectro de energia resultante das parametrizações de BenDaniel-Duke e também de Gora e Williams. Ambas forneceram autovalores de energia complexos, o que torna seus Hamiltonianos inválidos fisicamente. Assim, apesar de listarmos estas parametrizações na tabela 1, e de os respectivos autores terem estudado certos sistemas físicos com elas — efeitos da carga elétrica no tunelamento de elétrons, e transporte eletrônico em semicondutores gradeados, respectivamente —, pelo critério de Dutra e Almeida elas não são admissíveis fisicamente.

Com esta imposição Dutra e Almeida validaram as parametrizações de Zhou-Kroemer (ZK) e de Li-Kuhn. No entanto, impondo condições de continuidade da corrente de probabilidade na interface de heteroestruturas levou à conclusão de que a última não era adequada [1]. Em 2007 Mustafa e Mazharimousavi (MM) propuseram um outro conjunto, mostrado na tabela 1, que obedece tanto ao critério de Dutra e Almeida, quanto à conservação da probabilidade em heteroestruturas.

O comportamento de pacotes de onda gaussianos, livres e também sujeitos a potenciais parabólicos confinantes, em poços quânticos circulares foi estudado por Schmidt e colaboradores em [11]. As parametrizações de ZK e de MM foram postas à prova, e os tempos de *revival* foram calculados analiticamente, desta maneira um experimento foi proposto para verificar qual das duas seria de fato realizada neste tipo de sistema.

Capítulo 3

Sistemas Quânticos com Interação Spin-Órbita e Massa Efetiva constante

Neste capítulo trabalharemos primeiramente o Hamiltoniano para uma partícula com spin $1/2$ em duas dimensões com termo de interação spin-órbita do tipo Rashba e massa efetiva m^* constante, reproduziremos cálculos semelhantes aos de Foldi, Kálmán e Benedict [29] bem como os de Bulgakov e Sadreev [30] e apresentaremos as autofunções (espinores de Pauli) que são escritas em termos de funções de Bessel de primeira espécie de ordem inteira, em seguida atacaremos um problema análogo mas onde a interação spin-órbita é modelada via termo de Dresselhaus, uma técnica similar a empregada por Bulgakov e Sadreev pôde ser utilizada neste caso e apresentaremos as respectivas autofunções (espinores de Pauli), que agora são funções de Bessel modificadas de primeira espécie de ordem inteira, com essas autofunções podemos construir em ambos os casos uma combinação linear para formar a solução geral, não faremos o tratamento aqui para a solução geral em algum

caso particular (poços quânticos, pontos quânticos etc.), em ambos os casos investigaremos a conservação da componente J_z do momento angular total J , utilizando o teorema de Noether.

3.1 Interação Spin-Órbita via Termo de Rashba

Acoplamento spin-órbita revisitado

A natureza relativística deste acoplamento pode ser melhor compreendida por uma aproximação da equação relativística de Dirac para baixas energias, esta aproximação leva a uma correção na equação de Schrödinger (baixas energias) da seguinte forma (SI),

$$H_{so} = -\frac{\hbar}{(4m_0^2c^2)} \vec{\nabla}V(r) \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{P}), \quad (3.1)$$

onde $\vec{\sigma}$ é o vetor de Pauli, m_0 é a massa de repouso do elétron e $V(r)$ é o potencial eletrostático no qual o elétron se propaga e \vec{P} é o operador vetorial momento linear, a correção definida em (3.1) é conhecida como acoplamento spin-órbita (SO) de Pauli, na equação formal de Pauli aparecem outros termos como o termo de Zeeman, por exemplo, estes outros termos não serão considerados aqui.

Em sólidos cristalinos, a dinâmica dos elétrons é caracterizada por bandas de energia $E_n(k)$, sendo n o índice da banda e k o vetor de onda, assim como no caso atômico (SO tipo Pauli) esta interação causará importantes efeitos sobre a estrutura de banda de energia $E_n(k)$, temos como exemplo materiais semicondutores como o *GaAs*, a interação SO causa neste caso um “splitting” na banda de valência. Considerando então cristais diversos (rede de Bravais + base iônica), vamos apresentar dois tipos de acoplamento spin-órbita: o acoplamento do tipo Rashba [21] e do tipo Dresselhaus, ambos tem

uma forte relação com a estrutura cristalina considerada e suas simetrias, tratando de apresentar inicialmente o acoplamento Rashba.

Acoplamento spin-órbita via termo de Rashba:

Em heteroestruturas pode-se quebrar a simetria de inversão, que é uma simetria sob a troca de sinal das coordenadas dos íons da célula cristalina, através de perfis assimétricos na modulação da concentração de dopantes, através de estruturas assimétricas (heterojunções simples etc.) ou através da aplicação de campos elétricos externos, então temos um mecanismo de quebra de simetria, esta quebra de simetria de inversão dá origem a um termo conhecido como acoplamento spin-órbita de Rashba o termo associado a este acoplamento é dado por,

$$H_{so} = \alpha_R(\vec{P} \times \vec{\sigma})\hat{z}, \quad (3.2)$$

onde $\vec{\sigma}$ é o vetor de Pauli, \vec{P} é o operador vetorial momento linear e a constante α_R depende do material e do grau de assimetria estrutural do sistema. Por meio da aplicação de um campo elétrico na direção de crescimento pode-se aumentar ou diminuir esta assimetria, controlando desta forma o valor da constante de acoplamento α_R e conseqüentemente a intensidade da interação SO, este mecanismo tem despertado recente interesse, sobretudo no campo da spintrônica. Nesta dissertação, trabalharemos sempre com sistemas bi-dimensionais e portanto o nosso Hamiltoniano de Rashba (3.2) se escreverá como,

$$H_{so} = \alpha_R(P_x\sigma_y - P_y\sigma_x), \quad (3.3)$$

onde σ_y e σ_x são matrizes de Pauli e α_R é a constante de acoplamento, o termo de Dresselhaus será abordado posteriormente.

3.2 Hamiltoniano de Rashba

Nesta seção trabalharemos com um operador Hamiltoniano, que chamaremos Hamiltoniano de Rashba, no sentido de obter as suas componentes explicitamente, facilitando desta forma a construção de um problema de autovalor, este Hamiltoniano incorpora duas contribuições: uma puramente cinética, que será rotulada por um índice 0, e outra referente à interação spin-órbita (SO), que será rotulada por um índice so , assim o nosso Hamiltoniano de Rashba será simplesmente,

$$H = H_0 + H_{so}. \quad (3.4)$$

Convém lembrar que estamos trabalhando em um cenário bidimensional, diante disto a parte cinética e a parte correspondente à interação SO, que aqui é do tipo Rashba, tem o seguinte aspecto,

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + \alpha_R(P_x\sigma_y - P_y\sigma_x), \quad (3.5)$$

onde P é o operador momento, P_x e P_y são as suas componentes x e y , respectivamente, m^* é a massa efetiva do portador de carga, α_R é uma constante que depende da intensidade da interação SO, σ_y e σ_x são matrizes de Pauli. Então, utilizando estas matrizes e a matriz unitária $I_{2 \times 2}$ antes da componente cinética, temos a seguinte expressão para o nosso Hamiltoniano,

$$H = \frac{P^2}{2m^*} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \alpha_R \left[P_x \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - P_y \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right], \quad (3.6)$$

que, através de operações matriciais, também pode ser colocado em uma forma mais compacta, fornecendo como resultado um Hamiltoniano com quatro componentes,

$$H = \begin{pmatrix} \frac{P^2}{2m^*} & -\alpha_R[P_y + iP_x] \\ \alpha_R[iP_x - P_y] & \frac{P^2}{2m^*} \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Agora podemos verificar as componentes desse Hamiltoniano uma a uma, então vamos começar pelas componentes da diagonal principal, que são iguais e representam a parte puramente cinética da partícula, então,

$$H_{11} = H_{22} = H_0 = \frac{1}{2m^*}(P_x^2 + P_y^2), \quad (3.8)$$

aqui utilizaremos as seguintes transformações entre as componentes do operador momento em coordenadas cartesianas para polares,

$$\begin{aligned} P_x &= -i \cos \theta \partial_r + \frac{i}{r} \sin \theta \partial_\theta \\ P_y &= -i \sin \theta \partial_r - \frac{i}{r} \cos \theta \partial_\theta, \end{aligned} \quad (3.9)$$

utilizaremos diversas vezes esta transformação ao longo do trabalho. O cálculo do operador P_x^2 , usando estas transformações é imediato, assim:

$$P_x^2 = \left(-i \cos \theta \partial_r + \frac{i}{r} \sin \theta \partial_\theta \right)^2, \quad (3.10)$$

desenvolvendo o lado direito — lembrando que aqui lidamos com operadores que nem sempre comutam, então devemos ser cuidadosos quando formamos os produtos — temos a seguinte expressão,

$$P_x^2 = -\cos^2 \theta \partial_r^2 - \frac{1}{r^2} \cos \theta \sin \theta \partial_\theta - \frac{1}{r} \sin^2 \theta \partial_r - \frac{1}{r^2} \sin^2 \theta \partial_\theta^2, \quad (3.11)$$

agora, fazemos o mesmo para a componente y desse operador, assim,

$$P_y^2 = \left(-i \sin \theta \partial_r - \frac{i}{r} \cos \theta \partial_\theta \right)^2, \quad (3.12)$$

desenvolvendo o lado direito,

$$P_y^2 = -\sin^2 \theta \partial_r^2 + \frac{1}{r^2} \sin \theta \cos \theta \partial_\theta - \frac{1}{r} \cos^2 \theta \partial_r - \frac{1}{r^2} \cos^2 \theta \partial_\theta^2. \quad (3.13)$$

Somando (3.11) e (3.13), e realizando algumas simplificações chegamos a,

$$P_x^2 + P_y^2 = -\partial_r^2 - \frac{1}{r} \partial_r - \frac{1}{r^2} \partial_\theta^2, \quad (3.14)$$

e com a utilização desta expressão, podemos encontrar a componente $H_{11} = H_{22} = H_0$ da diagonal principal do Hamiltoniano de Rashba, massa efetiva constante, que é,

$$H_0 = -\frac{1}{2m^*} \left(\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\theta^2 \right). \quad (3.15)$$

Podemos também reescrever a componente acima usando os operadores $P_r = -i\partial_r$ e $L_z = -i\partial_\theta$ definidos convenientemente, assim, após a substituição destes, a componente fica,

$$H_0 = \frac{1}{2m^*} \left(P_r^2 + \frac{1}{r^2} L_z^2 - \frac{i}{r} P_r \right), \quad (3.16)$$

assim temos a componente H_0 correspondente a parte cinética da partícula, em coordenadas polares, do nosso Hamiltoniano de Rashba. Vamos agora voltar nossa atenção para as componentes fora da diagonal principal H_{12} e H_{21} , responsáveis pela interação SO, estas componentes também serão tratadas em coordenadas polares, conforme feito anteriormente para a componente cinética. Considere a componente H_{12} ,

$$H_{12} = -\alpha_R(P_y + iP_x), \quad (3.17)$$

aplicando as transformações (3.9) e fazendo algumas simplificações, podemos obter a componente H_{12} ,

$$H_{12} = -\alpha_R e^{-i\theta} \left(\partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta \right). \quad (3.18)$$

Por fim, encontraremos a componente H_{21} , da mesma forma anterior, então partiremos de,

$$H_{21} = \alpha_R(iP_x - P_y), \quad (3.19)$$

utilizando novamente as transformações (3.9) encontramos facilmente a componente H_{21} ,

$$H_{21} = \alpha_R e^{i\theta} \left(\partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta \right). \quad (3.20)$$

Assim concluímos a seção, onde encontramos as quatro componentes do Hamiltoniano de Rashba, sendo as componentes da diagonal principal iguais ($H_{11} = H_{22} = H_0$) e responsáveis pela parte cinética da partícula, e as componentes fora da diagonal principal H_{12} e H_{21} responsáveis pela interação spin-órbita, sabendo-se também que a massa efetiva m^* da partícula permaneceu constante, como foi dito antes! na próxima seção verificaremos uma importante lei de conservação para estes sistemas: a da conservação da componente J_z do momento angular total J , lembrando aqui que estamos trabalhando no caso bidimensional.

3.2.1 Conservação do Momento Angular

Nesta subseção verificaremos a conservação da componente J_z do momento angular total J em sistemas quânticos com massa constante, submetidos a uma interação spin-órbita do tipo Rashba. Para esta tarefa, utilizaremos o consagrado teorema de Noether, que relaciona simetrias e leis de conservação. Relembrando um pouco como ocorre a relação entre simetrias e leis de conservação na mecânica quântica, nós associamos um operador unitário \mathcal{U} com alguma operação, por exemplo, como a translação ou a rotação, este operador também pode ser reconhecido como um operador de simetria, que na forma infinitesimal, é dado pela seguinte expressão:

$$\mathcal{U} = I - \frac{i\epsilon}{\hbar}G, \quad (3.21)$$

onde I é o operador identidade, G é um operador Hermitiano e ϵ é um parâmetro infinitesimal. Se considerarmos que o Hamiltoniano é invariante sob a ação de \mathcal{U} , podemos representar isto da seguinte maneira,

$$H = \mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U}, \quad (3.22)$$

o que implica diretamente em,

$$[H, G] = 0, \quad (3.23)$$

a igualdade acima produz o seguinte resultado na equação de Heisenberg,

$$\frac{dG}{dt} = 0, \quad (3.24)$$

logo, o operador G representa uma constante do movimento, no nosso caso o operador G está associado com a componente J_z do momento angular total J , então, conforme vimos acima, basta provarmos a comutação entre este operador e o Hamiltoniano do sistema, que teremos uma quantidade conservada, em outras palavras, queremos provar que,

$$[H, J_z] = 0, \quad (3.25)$$

vamos então verificar se realmente a componente J_z se conserva no nosso caso, vale a pena lembrar que o nosso Hamiltoniano H é composto por duas parcelas, uma referente à parte cinética, que chamamos de H_0 e a outra referente à parte da interação spin-órbita, que chamamos de H_{so} , desta forma, o comutador inicial fica,

$$[H, J_z] = [H_0 + H_{so}, J_z] = [H_0, J_z] + [H_{so}, J_z], \quad (3.26)$$

sabendo-se que a componente J_z do operador momento angular total é,

$$J_z = L_z + S_z, \quad (3.27)$$

iremos analisar cada parcela do comutador (3.26), começando pela parcela referente à comutação com o termo cinético,

$$[H_0, J_z] = [H_0, L_z + S_z]. \quad (3.28)$$

A componente cinética H_0 tem a seguinte forma — esta expressão foi deduzida na seção anterior — em coordenadas polares,

$$H_0 = \frac{1}{2m^*} \left(P_r^2 + \frac{L_z^2}{r^2} - \frac{iP_r}{r} \right), \quad (3.29)$$

onde $L_z = -i\partial_\theta$, $P_r = -i\partial_r$ e m^* a massa efetiva do elétron, assim, substituindo esta expressão na relação (3.28), temos,

$$[H_0, J_z] = \frac{1}{2m^*} \left[\left(P_r^2 + \frac{L_z^2}{r^2} - \frac{iP_r}{r} \right), L_z + S_z \right], \quad (3.30)$$

usando as relações canônicas de comutação da Mecânica Quântica, bem como as propriedades operatoriais dos comutadores e conhecendo o fato do operador spin comutar com os operadores posição e momento linear, podemos facilmente provar a nulidade dos seguintes comutadores, que surgem quando desenvolvemos a expressão (3.30),

$$\begin{aligned} [P_r, L_z] &= [f(P_r), L_z] = [f(L_z), L_z] = [f(r), L_z] = 0, \\ [P_r, S_z] &= [f(P_r), S_z] = [f(L_z), S_z] = [f(r), S_z] = 0. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Estas relações ainda serão muito usadas em outras seções neste trabalho, assim, desenvolvendo a respectiva expressão e usando estes comutadores, podemos escrever para a parte em L_z ,

$$\left[\left(P_r^2 + \frac{L_z^2}{r^2} - \frac{iP_r}{r} \right), L_z \right] = [P_r^2, L_z] + \left[\frac{L_z^2}{r^2}, L_z \right] - i \left[\frac{P_r}{r}, L_z \right] = 0, \quad (3.32)$$

da mesma forma, podemos escrever para a parte em S_z ,

$$\left[\left(P_r^2 + \frac{L_z^2}{r^2} - \frac{iP_r}{r} \right), S_z \right] = [P_r^2, S_z] + \left[\frac{L_z^2}{r^2}, S_z \right] - i \left[\frac{P_r}{r}, S_z \right] = 0, \quad (3.33)$$

portanto, concluímos que o comutador da componente H_0 com a componente J_z é nulo, em outras palavras,

$$[H_0, J_z] = 0. \quad (3.34)$$

Passemos a analisar a segunda parcela do comutador (3.26), que incorpora a componente H_{so} referente à interação spin-órbita:

$$[H_{so}, J_z] = [H_{so}, L_z] + [H_{so}, S_z]. \quad (3.35)$$

A primeira parcela do lado direito da igualdade acima, utilizando a componente H_{so} já em coordenadas polares, fica:

$$[H_{so}, L_z] = 2\alpha_R \left[\frac{1}{r} S_r L_z - S_\theta P_r, L_z \right], \quad (3.36)$$

o cálculo do Hamiltoniano H_{so} , Rashba para coordenadas polares encontra-se no apêndice, usando uma regra da álgebra dos comutadores, separamos a expressão acima em duas parcelas, assim temos,

$$2\alpha_R \left[\frac{1}{r} S_r L_z - S_\theta P_r, L_z \right] = 2\alpha_R \left[\frac{1}{r} S_r L_z, L_z \right] - 2\alpha_R [S_\theta P_r, L_z]. \quad (3.37)$$

Desenvolvendo o lado direito da expressão acima e utilizando os comutadores (3.31) obtemos,

$$2\alpha_R \left[\frac{1}{r} S_r L_z, L_z \right] = 2\alpha_R \left(\frac{1}{r} [S_r, L_z] L_z \right), \quad (3.38)$$

e

$$2\alpha_R [S_\theta P_r, L_z] = 2\alpha_R [S_\theta, L_z] P_r. \quad (3.39)$$

Colocando estes resultados na expressão (3.36) temos,

$$[H_{so}, L_z] = 2\alpha_R \left(\frac{1}{r} [S_r, L_z] L_z - [S_\theta, L_z] P_r \right). \quad (3.40)$$

Agora vamos partir para a análise do comutador $[H_{so}, S_z]$, substituindo a componente H_{so} já em coordenadas polares, temos a seguinte expressão,

$$[H_{so}, S_z] = 2\alpha_R \left[\frac{1}{r} S_r L_z - S_\theta P_r, S_z \right], \quad (3.41)$$

conforme a abordagem já realizada, vamos aplicar uma regra da álgebra dos comutadores e separar a expressão acima em duas parcelas,

$$2\alpha_R \left[\frac{1}{r} S_r L_z - S_\theta P_r, S_z \right] = 2\alpha_R \left[\frac{1}{r} S_r L_z, S_z \right] - 2\alpha_R [S_\theta P_r, S_z]. \quad (3.42)$$

Tratando a primeira parcela do lado direito da igualdade acima e novamente utilizando os resultados em (3.31) temos a seguinte expressão,

$$\begin{aligned} 2\alpha_R \left[\frac{1}{r} S_r L_z, S_z \right] &= 2\alpha_R \left(\frac{1}{r} [S_r L_z, S_z] + \left[\frac{1}{r} L_z, S_z \right] S_z \right) \\ &= 2\alpha_R \left(\frac{1}{r} S_r [L_z, S_z] + \frac{1}{r} [S_r, S_z] L_z + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{r} [L_z, S_z] S_r + \left[\frac{1}{r}, S_z \right] L_z S_r \right) = 2\alpha_R \frac{1}{r} [S_r, S_z] L_z, \end{aligned} \quad (3.43)$$

e finalmente a partir da segunda parcela escrevemos,

$$2\alpha_R [S_\theta P_r, S_z] = 2\alpha_R (S_\theta [P_r, S_z] + [S_\theta, S_z] P_r) = 2\alpha_R [S_\theta, S_z] P_r, \quad (3.44)$$

assim, juntando as parcelas, temos o nosso comutador,

$$[H_{so}, S_z] = 2\alpha_R \left(\frac{1}{r} [S_r, S_z] L_z - [S_\theta, S_z] P_r \right), \quad (3.45)$$

adicionando as expressões (3.40) e (3.45),

$$[H_{so}, J_z] = 2\alpha_R \left([S_r, L_z] P_r - [S_\theta, L_z] P_r + \frac{1}{r} [S_r, S_z] L_z - [S_\theta, S_z] P_r \right). \quad (3.46)$$

Agora podemos utilizar as relações canônicas fundamentais do momento angular na expressão acima para produzir o seguinte resultado,

$$[H_{so}, J_z] = 2\alpha_R \left(\frac{1}{r} [S_r, L_z] L_z - [S_\theta, L_z] P_r - \frac{1}{r} i S_\theta L_z - i S_r P_r \right), \quad (3.47)$$

Para os dois comutadores restantes na expressão anterior, pode-se provar que os mesmos oferecem como resultado, (a prova encontra-se no apêndice)

$$[S_r, L_z] = i S_\theta, \quad [S_\theta, L_z] = -i S_r. \quad (3.48)$$

Após a substituição destes comutadores, encontramos o resultado esperado,

$$[H_{so}, J_z] = 0, \quad (3.49)$$

desta maneira, concluímos esta seção provando que a componente J_z do momento angular total, para sistemas com massa efetiva m^* constante e spin $1/2$, submetidos a uma interação spin-órbita do tipo Rashba se conserva, na próxima seção, usaremos os resultados da seção anterior para construir o nosso sistema de equações acopladas, por meio de um problema de autovalor.

3.2.2 Sistema de Equações Acopladas

Nesta seção, teremos a importante tarefa de construir um sistema de equações diferenciais acopladas, relacionadas com o nossa investigação dos sistemas quânticos, com massa efetiva m^* constante e spin $1/2$, submetidos a uma interação spin-órbita do tipo Rashba, para esta tarefa, nós utilizaremos as componentes do operador Hamiltoniano desenvolvido na seção (3.2), então, vamos partir da ideia de que podemos construir um problema de autovalor com o operador Hamiltoniano H , isto é, que podemos escrever,

$$H\psi(r, \theta) = E\psi(r, \theta), \quad (3.50)$$

onde E é o autovalor de energia da partícula e a autofunção $\psi(r, \theta)$ é um espinor com duas componentes (formalismo bi-componente de Pauli), isto é,

$$\psi(r, \theta) = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (3.51)$$

assim, temos a seguinte equação matricial,

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

Verificamos anteriormente que o Hamiltoniano de Rashba e o operador J_z comutam — portanto as autofunções do operador J_z também são autofunções do Hamiltoniano — vamos propor para o espinor o seguinte ansatz,

$$\psi(r, \theta) = \begin{pmatrix} a_k f(r) e^{im\theta} \\ b_k g(r) e^{i(m+1)\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.53)$$

onde a_k e b_k são constantes arbitrárias e m é o número quântico de momento angular. Das relações de comutação da seção anterior podemos também deduzir que as autofunções do operador momento angular também são autofunções do Hamiltoniano. A equação matricial (3.52) com a utilização do espinor tentativa (3.53) nos fornece duas expressões, com a primeira tendo a seguinte forma,

$$H_{11}a_k f(r) e^{im\theta} + H_{12}b_k g(r) e^{i(m+1)\theta} = E a_k f(r) e^{im\theta}, \quad (3.54)$$

substituindo as componentes H_{11} e H_{12} do Hamiltoniano na equação acima (estas componentes foram determinadas na seção (3.2)) temos, de uma forma mais explícita,

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2m^*} \left[\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\theta^2 \right] a_k f(r) e^{im\theta} - \alpha_R e^{-i\theta} \left[\partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta \right] b_k g(r) e^{i(m+1)\theta} \\ & = E a_k f(r) e^{im\theta}, \end{aligned} \quad (3.55)$$

desenvolvendo os cálculos e fazendo as simplificações necessárias, chegamos à expressão abaixo, onde podemos eliminar a parte angular, esta é a nossa primeira equação do sistema,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left(2m^* E - \frac{m^2}{r^2} \right) \right] f(r) = -\alpha_R \left(\frac{2m^* b_k}{a_k} \right) \left[\frac{d}{dr} + \frac{(m+1)}{r} \right] g(r). \quad (3.56)$$

A segunda expressão obtida da equação matricial (3.52) é,

$$H_{21}a_k f(r) e^{im\theta} + H_{22}b_k g(r) e^{i(m+1)\theta} = E b_k g(r) e^{i(m+1)\theta}, \quad (3.57)$$

substituindo as componentes H_{21} e H_{22} do Hamiltoniano na equação acima, verificamos novamente que as exponenciais podem ser simplificadas, o que resulta na segunda equação do sistema,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left(2m^*E - \frac{(m+1)^2}{r^2} \right) \right] g(r) = \alpha_R \left(\frac{2m^*a_k}{b_k} \right) \left[\frac{d}{dr} - \frac{m}{r} \right] f(r). \quad (3.58)$$

Assim, obtemos um sistema de equações diferenciais acopladas dado por (3.56) e (3.58). As equações deste sistema se assemelham bastante com equações do tipo Bessel, na próxima seção, partiremos então para a resolução do respectivo sistema.

3.2.3 Autofunções

Esta subseção será dedicada a resolver o sistema proposto na subseção anterior, queremos encontrar as suas autofunções para que possamos extrair propriedades importantes destas, começaremos então a nossa tarefa analisando a equação (3.56), o lado direito desta equação é muito semelhante a um dos lados de uma importante identidade oriunda da teoria das funções de Bessel, isto é, aqui pode estar uma oportunidade de desacoplar estas equações, nos valendo de identidades da teoria das funções de Bessel [31, 32]. Assim, vamos apresentar a tal identidade que utilizaremos com este objetivo, esta identidade é,

$$\left[\frac{d}{dr} + \frac{(m+1)}{r} \right] J_{m+1}(kr) = kJ_m(kr), \quad (3.59)$$

onde $J_m(kr)$ e $J_{m+1}(kr)$ são funções de Bessel de primeira espécie de ordem m e $m+1$ respectivamente, sendo m um número inteiro, usando este operador do lado direito da equação (3.56), e nomeando também as funções $g(r)$ e $f(r)$

como,

$$\begin{aligned} g(r) &= J_{m+1}(kr) \\ f(r) &= J_m(kr), \end{aligned} \quad (3.60)$$

teremos, após as substituições,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left(2m^*E - \frac{m^2}{r^2} \right) \right] J_m(kr) = -\alpha_R \left(\frac{2m^*b_k}{a_k} \right) k J_m(kr), \quad (3.61)$$

assim, depois de mais algumas simplificações, chegamos ao seguinte resultado para a equação (3.56),

$$\frac{d^2}{dr^2} J_m(kr) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} J_m(kr) + \left[\left(2m^*E + \frac{2m^*\alpha_R b_k k}{a_k} \right) - \frac{m^2}{r^2} \right] J_m(kr) = 0, \quad (3.62)$$

definindo,

$$k^2 = \left(2m^*E + \frac{2m^*\alpha_R b_k k}{a_k} \right), \quad (3.63)$$

observamos que se utilizarmos a identidade (3.59) encontraremos uma equação de Bessel de primeira espécie de ordem m ,

$$\frac{d^2}{dr^2} J_m(kr) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} J_m(kr) + \left(k^2 - \frac{m^2}{r^2} \right) J_m(kr) = 0. \quad (3.64)$$

A solução desta equação é imediata: função de Bessel de primeira espécie de ordem m , após este resultado, e conhecendo as propriedades das equações e das funções de Bessel, podemos partir para encontrar os possíveis valores de k usando a relação (3.63), então,

$$k^2 - \left(\frac{2m^*\alpha_R b_k}{a_k} \right) k - 2m^*E = 0, \quad (3.65)$$

que é uma equação quadrática em k , assim, resolvendo esta equação, temos para as suas raízes:

$$k_{1\pm} = \frac{\alpha_R m^* b_k}{a_k} \pm \sqrt{\left(\frac{\alpha_R m^* b_k}{a_k} \right)^2 + 2m^*E}. \quad (3.66)$$

Agora para resolvermos a equação (3.58), usaremos um procedimento semelhante, além disso podemos encontrar na literatura disponível [32, 31] uma relação entre funções de Bessel análoga à (3.59), mas agora para subir a ordem de uma unidade, ou seja,

$$\left[\frac{d}{dr} - \frac{m}{r} \right] J_m(kr) = -kJ_{m+1}(kr), \quad (3.67)$$

aqui também usaremos as correspondências (3.60), trabalhando o lado direito da equação (3.58) usando a relação acima, temos:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left(2m^*E - \frac{(m+1)^2}{r^2} \right) \right] J_{m+1}(kr) = -\alpha_R \left(\frac{2m^*a_k}{b_k} \right) k J_{m+1}(kr), \quad (3.68)$$

fazendo algumas operações de simplificação na expressão anterior,

$$\frac{d^2}{dr^2} J_{m+1}(kr) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} J_{m+1}(kr) + \left[\left(2m^*E + \frac{2m^*\alpha_R a_k k}{b_k} \right) - \frac{(m+1)^2}{r^2} \right] J_{m+1}(kr) = 0, \quad (3.69)$$

definimos como no caso anterior,

$$k^2 = \left(2m^*E + \frac{2m^*\alpha_R a_k k}{b_k} \right), \quad (3.70)$$

e encontramos novamente uma equação de Bessel de primeira espécie, de ordem $m+1$,

$$\frac{d^2}{dr^2} J_{m+1}(kr) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} J_{m+1}(kr) + \left(k^2 - \frac{(m+1)^2}{r^2} \right) J_{m+1}(kr) = 0. \quad (3.71)$$

Aqui também a solução dessa equação é imediata: função de Bessel de primeira espécie de ordem $m+1$. Novamente, vamos encontrar os possíveis valores de k , para isto resolvemos a equação algébrica,

$$k^2 - \left(\frac{2m^*\alpha_R a_k}{b_k} \right) k - 2m^*E = 0, \quad (3.72)$$

cujas raízes são calculadas facilmente,

$$k_{2\pm} = \frac{\alpha_R m^* a_k}{b_k} \pm \sqrt{\left(\frac{\alpha_R m^* a_k}{b_k} \right)^2 + 2m^*E}. \quad (3.73)$$

Assim usando as funções de Bessel J_m e J_{m+1} obtidas das equações anteriores, podemos construir os nossos espinores, fazendo $a_k = b_k$, os espinores para valores de $k_{1\pm}$ são,

$$\psi_1(r, \theta) = \begin{pmatrix} J_m(k_{1+}r)e^{im\theta} \\ J_{m+1}(k_{1+}r)e^{i(m+1)\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.74)$$

e

$$\psi_2(r, \theta) = \begin{pmatrix} J_m(k_{1-}r)e^{im\theta} \\ J_{m+1}(k_{1-}r)e^{i(m+1)\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.75)$$

enquanto que para o caso $a_k = -b_k$, os espinores para esses valores de $k_{2\pm}$ serão,

$$\psi_3(r, \theta) = \begin{pmatrix} J_m(k_{2+}r)e^{im\theta} \\ -J_{m+1}(k_{2+}r)e^{i(m+1)\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.76)$$

e

$$\psi_4(r, \theta) = \begin{pmatrix} J_m(k_{2-}r)e^{im\theta} \\ -J_{m+1}(k_{2-}r)e^{i(m+1)\theta} \end{pmatrix}. \quad (3.77)$$

Desta forma, a solução geral da equação de Pauli (3.52) é uma combinação linear destes quatro espinores,

$$\psi(r, \theta) = \sum_{n=1}^4 c_n \psi_n(r, \theta), \quad (3.78)$$

onde os coeficientes c_n são constantes arbitrárias que podem ser determinadas se considerarmos condições de contorno em um determinado problema, como por exemplo, se a partícula estiver confinada em um poço anelar de altura infinita, raio interno r_1 , raio externo r_2 , podemos determinar condições de contorno tais que,

$$\psi(r_1, \theta) = 0 \quad (3.79)$$

$$\psi(r_2, \theta) = 0, \quad (3.80)$$

estas igualdades nos fornecem quatro equações de onde podemos obter c_1, c_2, c_3 e c_4 . Em geral, o que fazemos é resolver um sistema composto por três destas equações juntamente com a condição de normalização do espinor, assim é possível obter uma solução não-trivial facilmente. Não faremos o tratamento particular aqui para alguma região do cristal bi-dimensional limitada por alguma fronteira (poços quânticos), isto faremos quando tratarmos o caso para a massa variável no capítulo 4, aqui apenas apresentamos a solução geral para sistemas quânticos com massa constante e com o termo de Rashba, é importante comentar que esta interação tem um importante efeito sobre a banda de energia do material, aqui podemos perceber que a solução geral da equação (3.52) possui quatro espinores linearmente independentes, isto ocorre porque a interação SO quebra a degenerescência de spin na banda (“spin-splitting”), criando dois estados com o mesmo vetor de onda, se propagando para a direita (ou esquerda) mas com energias associadas diferentes, esta diferença de energia vem do fato de termos um acoplamento entre o momento angular orbital L e o spin S aproximadamente “paralelo” ou “anti-paralelo”, estas considerações também valem para uma onda eletrônica (espinor) se propagando com vetor de onda k negativo (onda se propagando para a esquerda), assim temos um total de quatro estados degenerados. Por fim vamos apresentar as relações de dispersão para o elétron neste caso, que podem ser obtidas facilmente, as relações são,

$$E_{\pm}(k) = \frac{k^2}{2m^*} \pm \alpha_R k, \quad (3.81)$$

Aqui suprimimos os sub-índices $1\pm$ e $2\pm$ do vetor k por conveniência. Podemos perceber que as relações acima são parabólicas e indicam claramente o “spin-splitting” na banda de energia (as parábolas são deslocadas do centro pelo termo $\pm\alpha_R$). Se não houvesse a interação SO, a constante α_R seria nula e a relação $E(k)$ seria simétrica.

3.3 Interação Spin-Órbita via Termo de Dresselhaus

Aqui apresentaremos a ideia do acoplamento spin-órbita (SO) de Dresselhaus, que também ocorre em heteroestruturas cristalinas. Assim, em estruturas cristalinas do tipo “zinc-blend”, muito comum em materiais do grupo III-IV, como o *InAs*, o *GaAs*, o *InSb*, entre outros, a ausência de um centro de simetria de inversão espacial, denominada assimetria de inversão “bulk” da estrutura cristalina (*bulk inversion asymmetry - BIA*) induz ao surgimento de um campo cristalino efetivo, sendo responsável também pela quebra de degenerescência das bandas associadas ao spin. Tal efeito leva ao chamado termo de Dresselhaus que é inerente do material considerado. No nosso caso, como mencionado antes, trabalharemos unicamente com sistemas bidimensionais, desta forma o termo de Dresselhaus assume a seguinte forma,

$$H_{so} = \alpha_D(P_x\sigma_x - P_y\sigma_y), \quad (3.82)$$

onde σ_x e σ_y são matrizes de Pauli e α_D é a constante de acoplamento de Dresselhaus, que está relacionada com a intensidade da interação SO.

3.4 Hamiltoniano de Dresselhaus

Nesta seção faremos um trabalho semelhante ao que foi feito para o caso Rashba, mas agora utilizando uma interação spin-órbita do tipo Dresselhaus, as considerações são semelhantes, não nos prolongaremos tanto como no caso anterior, mas vamos procurar chamar a atenção para os pontos onde existem diferenças importantes, o Hamiltoniano neste caso também tem a seguinte forma,

$$H = H_0 + H_{so}, \quad (3.83)$$

onde o termo cinético é o mesmo do caso anterior, mas o termo referente à interação SO tem um aspecto diferente, O Hamiltoniano então fica,

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + \alpha_D(P_x\sigma_x - P_y\sigma_y), \quad (3.84)$$

então usando o operador identidade I_2 e as matrizes de Pauli, reescrevemos o Hamiltoniano na seguinte forma,

$$H = \frac{P^2}{2m^*} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \alpha_D \left[P_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - P_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right], \quad (3.85)$$

depois de algumas simplificações, temos uma forma mais compacta para o nosso Hamiltoniano,

$$H = \begin{pmatrix} \frac{P^2}{2m^*} & \alpha_D[P_x + iP_y] \\ \alpha_D[P_x - iP_y] & \frac{P^2}{2m^*} \end{pmatrix}. \quad (3.86)$$

As componentes da diagonal principal já foram calculadas no caso Rashba, elas são as mesmas aqui, portanto nos ocuparemos somente em calcular as componentes fora da diagonal principal, relacionadas com a interação SO, começaremos pela componente H_{12} :

$$H_{12} = \alpha_D[P_x + iP_y], \quad (3.87)$$

usando a transformação de coordenadas (3.9) temos,

$$H_{12} = \alpha_D \left[\left(-i \cos \theta \partial_r + \frac{i}{r} \sin \theta \partial_\theta \right) + i \left(-i \sin \theta \partial_r - \frac{i}{r} \cos \theta \partial_\theta \right) \right], \quad (3.88)$$

o que resulta diretamente em,

$$H_{12} = -i\alpha_D e^{i\theta} \left(\partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta \right), \quad (3.89)$$

procedendo de forma análoga determinamos a componente H_{21} partindo de,

$$H_{21} = \alpha_D(P_x - iP_y), \quad (3.90)$$

usando as transformações vistas no caso anterior, obtemos,

$$H_{21} = -i\alpha_D e^{-i\theta} \left(\partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta \right). \quad (3.91)$$

Assim concluímos a nossa subseção com a determinação das componentes fora da diagonal principal do Hamiltoniano de Dresselhaus, podemos reparar que estas componentes guardam uma certa semelhança com as mesmas componentes para o caso Rashba (lembrando contudo que as constantes α_R e α_D não são necessariamente iguais).

3.4.1 Conservação do Momento Angular

Nesta subseção analisaremos a possível conservação da componente J_z do momento angular total J para um sistema com massa efetiva m^* constante, spin 1/2, submetido a uma interação spin-órbita do tipo Dresselhaus, a componente cinética H_0 do Hamiltoniano total H neste caso é a mesma do caso anterior, onde tratamos sistemas com interação spin-órbita do tipo Rashba, o que muda agora é somente a parte referente à interação spin-órbita, logo, os cálculos que levaram à confirmação da conservação da componente J_z do momento angular total, utilizando unicamente a componente cinética H_0 , não serão reproduzidos aqui, estes cálculos já foram feitos na subseção (3.2.1), nesta subseção, trataremos de provar somente a conservação da componente J_z , utilizando a parte do Hamiltoniano relacionada com a interação spin-órbita, que agora, é do tipo Dresselhaus, como dito anteriormente.

Começamos o nosso tratamento, partindo da seguinte expressão de comutadores,

$$[H_{so}, J_z] = [H_{so}, L_z + S_z] = [H_{so}, L_z] + [H_{so}, S_z], \quad (3.92)$$

a primeira parcela acima, já substituindo a componente H_{so} em coordenadas

polares, resulta em,

$$[H_{so}, L_z] = 2\alpha_D \left[S_r P_r + \frac{1}{r} S_\theta L_z, L_z \right], \quad (3.93)$$

utilizando o cálculo do Hamiltoniano H_{so} para a interação SO via termo de Dresselhaus para coordenadas polares que se encontra no apêndice,

$$2\alpha_D \left[S_r P_r + \frac{1}{r} S_\theta L_z, L_z \right] = 2\alpha_D [S_r P_r, L_z] + 2\alpha_D \left[\frac{1}{r} S_\theta L_z, L_z \right], \quad (3.94)$$

e usando propriedades da álgebra dos comutadores e usando também as relações (3.31), encontramos o seguinte resultado para a primeira parcela do lado direito da igualdade anterior,

$$2\alpha_D [S_r P_r, L_z] = 2\alpha_D [S_r, L_z] P_r. \quad (3.95)$$

Da mesma forma, encontramos para a segunda parcela,

$$2\alpha_D \left[\frac{1}{r} S_\theta L_z, L_z \right] = 2\alpha_D \frac{1}{r} [S_\theta, L_z] L_z, \quad (3.96)$$

vamos tratar agora a segunda parcela de (3.92), isto é,

$$[H_{so}, S_z] = 2\alpha_D \left[S_r P_r + \frac{1}{r} S_\theta L_z, S_z \right], \quad (3.97)$$

fazendo uma separação de termos na expressão acima, temos,

$$2\alpha_D \left[S_r P_r + \frac{1}{r} S_\theta L_z, S_z \right] = 2\alpha_D [S_r P_r, S_z] + 2\alpha_D \left[\frac{1}{r} S_\theta L_z, S_z \right]. \quad (3.98)$$

Podemos tratar as duas parcelas que aparecem na expressão anterior, separadamente, como foi feito para L_z . Assim, utilizando ainda os resultados (3.31), e propriedades dos comutadores, temos para a primeira parcela,

$$2\alpha_D [S_r P_r, S_z] = 2\alpha_D [S_r, S_z] P_r, \quad (3.99)$$

bem como para a segunda,

$$2\alpha_D \left[\frac{1}{r} S_\theta L_z, S_z \right] = 2\alpha_D \frac{1}{r} [S_\theta, S_z] L_z. \quad (3.100)$$

Combinando todos esses resultados na expressão (3.92), temos,

$$[H_{so}, J_z] = 2\alpha_D \left([S_r, L_z]P_r + \frac{1}{r}[S_\theta, L_z]L_z + [S_r, S_z]P_r + \frac{1}{r}[S_\theta, S_z]L_z \right). \quad (3.101)$$

Aqui podemos utilizar as relações canônicas do momento angular, e também podemos utilizar as relações (3.48) que surgiram no caso Rashba, e que estão demonstradas no apêndice, a utilização dos comutadores (3.48) nos levará portanto ao resultado que buscamos nesta seção, o da conservação da componente J_z do momento angular total J , quando o sistema está submetido a uma interação spin-órbita do tipo Dresselhaus, assim, com a utilização de (3.48), junto com as relações canônicas do momento angular, a seguinte igualdade nos é apresentada,

$$[H_{so}, L_z] + [H_{so}, S_z] = 2\alpha_D \left(iS_\theta P_r - \frac{i}{r}S_r L_z - iS_\theta P_r + \frac{1}{r}(iS_r)L_z \right), \quad (3.102)$$

Onde a expressão do lado direito da igualdade é indubitavelmente nula,

$$[H_{so}, L_z] + [H_{so}, S_z] = 0, \quad (3.103)$$

assim, a nulidade do comutador acima garante que temos a conservação da componente J_z do momento angular total J , para partículas com massa efetiva m^* constante, em uma região bidimensional e submetidas a uma interação spin-órbita do tipo Dresselhaus (vide teorema de Noether). Na próxima subseção, buscaremos um sistema de equações acopladas para este caso, da mesma forma que fizemos para o caso Rashba.

3.4.2 Sistema de Equações Acopladas

Nessa subseção seguiremos os mesmos passos da subseção onde tratamos do caso Rashba, assim começamos com um problema de autovalor,

$$H\psi(r, \theta) = E\psi(r, \theta), \quad (3.104)$$

onde temos que a autofunção $\psi(r, \theta)$ é um espinor de duas componentes escrito na equação (3.51). Colocando de uma forma mais explícita, teremos uma equação matricial de onde tiraremos um sistema de equações acopladas, conforme fizemos no caso Rashba teremos um sistema de equações acopladas (3.52).

Vamos escolher para o nosso espinor o seguinte ansatz,

$$\psi(r, \theta) = \begin{pmatrix} a_k g(r) e^{i(m+1)\theta} \\ b_k f(r) e^{im\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.105)$$

substituindo este espinor na equação de autovalor e desenvolvendo as operações, obtemos a nossa primeira expressão, de onde tiraremos uma das equações do sistema, então,

$$H_{11} a_k g(r) e^{i(m+1)\theta} + H_{12} b_k f(r) e^{im\theta} = E a_k g(r) e^{i(m+1)\theta}, \quad (3.106)$$

substituindo a componente H_0 e a componente H_{12} do Hamiltoniano de Dresselhaus calculada na seção (3.2), na equação acima, temos, de uma forma mais explícita,

$$\begin{aligned} & \frac{-a_k}{2m^*} e^{i(m+1)\theta} \left[\partial_r^2 - \frac{(m+1)^2}{r^2} + \frac{1}{r} \partial_r \right] g(r) - E a_k g(r) e^{i(m+1)\theta} = \\ & = i\alpha_D b_k e^{i(m+1)\theta} \left[\partial_r - \frac{m}{r} \right] f(r), \end{aligned} \quad (3.107)$$

simplificando as exponenciais temos a nossa forma final para a primeira equação do sistema Dresselhaus,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left(2m^* E - \frac{(m+1)^2}{r^2} \right) \right] g(r) = -i\alpha_D \left(\frac{2m^* b_k}{a_k} \right) \left[\frac{d}{dr} - \frac{m}{r} \right] f(r). \quad (3.108)$$

Seguindo o mesmo raciocínio para obter a nossa segunda equação, partimos da expressão,

$$H_{21} a_k g(r) e^{i(m+1)\theta} + H_{22} b_k f(r) e^{im\theta} = E b_k f(r) e^{im\theta}, \quad (3.109)$$

substituindo a componente H_0 e a componente H_{21} calculada na seção (3.2)

na equação acima, e simplificando a parte angular, chega-se a,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left(2m^*E - \frac{m^2}{r^2} \right) \right] f(r) = -i\alpha_D \left(\frac{2m^*a_k}{b_k} \right) \left[\frac{d}{dr} + \frac{(m+1)}{r} \right] g(r), \quad (3.110)$$

que é a nossa segunda equação do sistema Dresselhaus. Na próxima subseção partiremos para a tarefa de resolver este sistema de equações.

3.4.3 Autofunções

Nesta subseção tentaremos nos guiar pelos métodos empregados na subseção (3.2.3) onde atacamos o caso Rashba e conseguimos desacoplar as equações naquela ocasião. Utilizando uma metodologia oriunda da teoria das funções de Bessel, acreditamos que podemos utilizar a mesma técnica aqui, pela grande semelhança entre os sistemas de Rashba e Dresselhaus, como pudemos perceber, o problema é que existem alguns detalhes como a unidade imaginária que aparece no lado direito das equações, assim podemos nos perguntar, como lidamos com elas? Como isto irá influenciar na resolução do nosso problema? Vamos começar tratando a equação (3.108), do sistema da subseção anterior,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left(2m^*E - \frac{(m+1)^2}{r^2} \right) \right] g(r) = -i\alpha_D \left(\frac{2m^*b_k}{a_k} \right) \left[\frac{d}{dr} - \frac{m}{r} \right] f(r), \quad (3.111)$$

aqui usaremos as mesmas correspondências vistas em (3.60), também vamos definir,

$$\beta = 2m^* \frac{b_k}{a_k}, \quad \delta = 2m^* \frac{a_k}{b_k}, \quad (3.112)$$

então, usando a relação da teoria das funções de Bessel (3.67), bem como as relações definidas logo acima,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left(2m^*E - \frac{(m+1)^2}{r^2} \right) \right] J_{m+1}(kr) = i\alpha_D \beta k J_{m+1}(kr), \quad (3.113)$$

introduzindo,

$$-k^2 = 2m^*E - i\alpha_D\beta k, \quad (3.114)$$

e substituindo esta expressão na equação anterior obtemos,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \left(k^2 + \frac{(m+1)^2}{r^2} \right) \right] J_{m+1}(kr) = 0, \quad (3.115)$$

onde o valor de k pode ser calculado resolvendo-se $k^2 - i\alpha_D\beta k + 2m^*E = 0$, logo

$$k_{1\pm}^D = i \left(\frac{\alpha_D\beta}{2} \pm \sqrt{2m^*E + \left(\frac{\alpha_D\beta}{2} \right)^2} \right), \quad (3.116)$$

ou seja, o k de Dresselhaus é igual ao k de Rashba multiplicado pela unidade imaginária i (se as constantes de interação α_R e α_D forem exatamente iguais, claro) isto é,

$$k_{1\pm}^D = ik_{1\pm}^R, \quad (3.117)$$

se estas constantes não forem iguais, podemos escrever também,

$$k_{1\pm}^D = ik_{1\pm}^d, \quad (3.118)$$

onde $k_{1\pm}^d = |k_{1\pm}^D|$ e consequentemente $k_{1\pm}^d \neq k_{1\pm}^R$ então,

$$J_{m+1}(k^D r) = J_{m+1}(ik^d r). \quad (3.119)$$

Aqui vamos suprimir os sub-índices ± 1 por enquanto, para não sobrecarregar a notação, então vamos apresentar a seguinte relação entre funções de Bessel e funções modificadas de Bessel de primeira espécie de ordem $m+1$,

$$J_{m+1}(ik^d r) = i^{(m+1)} I_{m+1}(k^d r). \quad (3.120)$$

Assim, substituindo o resultado acima na equação (3.115), temos,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \left(k^2 + \frac{(m+1)^2}{r^2} \right) \right] J_{m+1}(ik^d r) = 0. \quad (3.121)$$

Finalmente, apresentamos o resultado final que pode ser facilmente reconhecido como uma equação de Bessel modificada de primeira espécie de ordem $m + 1$,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \left(k^2 + \frac{(m+1)^2}{r^2} \right) \right] I_{m+1}(k^d r) = 0. \quad (3.122)$$

As soluções desta equação são as funções modificadas de Bessel de primeira espécie de ordem $m + 1$. Agora vamos prosseguir para a resolução da equação (3.110), então temos,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left(2m^* E - \frac{m^2}{r^2} \right) \right] f(r) = -i\alpha_D \left(\frac{2m^* a_k}{b_k} \right) \left[\frac{d}{dr} + \frac{(m+1)}{r} \right] g(r), \quad (3.123)$$

usando a propriedade (3.59), reescrevemos a equação acima como,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \left(2m^* E + i\alpha_D \delta k - \frac{m^2}{r^2} \right) \right] J_m(kr) = 0, \quad (3.124)$$

definindo $-k^2 = 2m^* E + i\alpha_D \delta k$ e substituindo esta definição na equação anterior temos,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \left(k^2 + \frac{m^2}{r^2} \right) \right] J_m(kr) = 0, \quad (3.125)$$

assim os valores possíveis de k podem ser obtidos facilmente,

$$k_{2\pm}^D = i \left(-\frac{\alpha_D \delta}{2} \pm \sqrt{2m^* E + \left(\frac{\alpha_D \delta}{2} \right)^2} \right), \quad (3.126)$$

ou seja, o k de Dresselhaus é igual ao k de Rashba multiplicado pela unidade imaginária i , se as constantes α_D e α_R forem iguais, isto é,

$$k_{2\pm}^D = i k_{2\pm}^R. \quad (3.127)$$

Contudo, se as constantes α_D e α_R não forem as mesmas, temos a seguinte relação $k_{2\pm}^D = i k_{2\pm}^d$ logo $J_m(k^D r) = J_m(i k^d r)$. Para simplificar a

notação vamos suprimir por enquanto os sub-índices $2\pm$, os mesmos serão reutilizados depois. Prosseguindo, apresentamos novamente a relação entre funções de Bessel e funções modificadas de Bessel de primeira espécie de ordem m , $J_m(ik^d r) = i^m I_m(k^d r)$.

Por fim, temos um resultado semelhante ao caso anterior,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \left(k^2 + \frac{m^2}{r^2} \right) \right] I_m(k^d r) = 0, \quad (3.128)$$

que é simplesmente uma equação de Bessel modificada de primeira espécie de ordem m , a solução desta equação também é imediata: funções modificadas de Bessel de primeira espécie de ordem m . Logo, com este resultado e o anterior, podemos enfim construir os nossos espinores,

$$\psi_1(r, \theta) = \begin{pmatrix} I_{m+1}(k_{1+} r) e^{i(m+1)\theta} \\ I_m(k_{1+} r) e^{im\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.129)$$

e

$$\psi_2(r, \theta) = \begin{pmatrix} I_{m+1}(k_{1-} r) e^{i(m+1)\theta} \\ I_m(k_{1-} r) e^{im\theta} \end{pmatrix}. \quad (3.130)$$

Enquanto que para os momentos k_{2+} encontramos,

$$\psi_3(r, \theta) = \begin{pmatrix} I_{m+1}(k_{2+} r) e^{i(m+1)\theta} \\ I_m(k_{2+} r) e^{im\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.131)$$

e

$$\psi_4(r, \theta) = \begin{pmatrix} I_{m+1}(k_{2-} r) e^{i(m+1)\theta} \\ I_m(k_{2-} r) e^{im\theta} \end{pmatrix}. \quad (3.132)$$

Aqui consideramos $a_k = b_k$. Então, temos finalmente para a solução geral da equação de autovalor para o caso Dresselhaus,

$$\psi_l(r, \theta) = \sum_{l=1}^4 c_l \psi_l(r, \theta), \quad (3.133)$$

onde os coeficientes c_l podem ser obtidos impondo-se condições de contorno adequadas para o sistema e a condição de normalização, não faremos uma análise aqui para estes sistemas em condições de confinamento (anéis quânticos, pontos quânticos, poços quânticos etc.), nem obteremos os seus espectros discretos de energia. Aqui apenas apresentamos a solução geral do problema, convém comentar que a solução encontrada, assim como no caso Rashba, contém quatro componentes linearmente independentes, demonstrando que a interação SO com termo de Dresselhaus também quebra a degenerescência de spin na banda (“spin-splitting”), ou seja, o acoplamento spin-órbita causa uma pequena mudança na energia dos estados, dependendo da orientação relativa dos operadores spin S e momento angular orbital L . As relações de dispersão podem ser obtidas facilmente e são,

$$E_{\pm}(k) = \frac{k^2}{2m^*} \pm \alpha_D k. \quad (3.134)$$

Aqui os sub-índices do vetor de onda k , $1\pm$ e $2\pm$, foram suprimidos para não sobrecarregar a notação. Estas relações $E(k)$ são parabólicas e se reduzem a um caso mais simples quando $\alpha_D = 0$.

Capítulo 4

Sistemas Quânticos com Interação Spin-Órbita e Massa Efetiva Dependente da Posição

4.1 Introdução

Iniciamos o capítulo onde de fato trataremos os aspectos mais importantes deste trabalho: a análise dos sistemas quânticos com massa efetiva dependente da posição e submetidos a uma interação spin-órbita particular. Neste capítulo estudamos primeiramente o Hamiltoniano para uma partícula com spin $1/2$ em duas dimensões com termo de interação de spin-órbita do tipo Rashba e massa efetiva dependente da posição radial com a forma $\mu(r) = \mu_1 r^2$, onde $\mu_1 > 0$, resolvemos a equação de Pauli para este sistema por meio de aproximações sucessivas e apresentamos as suas autofunções considerando um poço anelar, em seguida analisamos o mesmo problema mas com interação spin-órbita descrita pelo termo de Dresselhaus, ambos os sistemas levam a equações parecidas, mas a componente superior do espinor

que é solução do primeiro caso (Rashba) surge como a componente inferior da solução do segundo (Dresselhaus) e vice-versa.

4.2 Hamiltoniano de Rashba

Nesta seção, vamos apresentar o Hamiltoniano \mathcal{H} para um sistema com spin $1/2$, submetido a uma interação spin-órbita do tipo Rashba e com massa efetiva dependente da posição radial $\mu(r)$ determinando as suas componentes, como fizemos para o caso da massa constante, primeiramente vamos iniciar a nossa investigação pela componente cinética \mathcal{H}_0 , como temos feito (lembrando que esta componente ocupa a diagonal principal do operador) para isto, nos muniremos de um dos resultados fundamentais para o nosso trabalho que é o Hamiltoniano cinético para sistemas com massa efetiva dependente da posição (PDM), este Hamiltoniano surgiu originalmente no artigo de von Roos [20], onde o mesmo o introduz, baseando-se e aproveitando resultados obtidos por outros autores, resultados estes aparentemente desconhecidos (Gora e Williams, Zhu e Kroemer), mas que foram incorporados em uma síntese representada por este Hamiltoniano. O respectivo Hamiltoniano, devido a von Roos, já foi apresentado nesta dissertação, em capítulos anteriores, vamos rerepresentá-lo aqui como ponto de partida para iniciarmos o desenvolvimento dos objetivos da presente seção, assim,

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{1}{2} [\mu^\alpha(r)\partial_i\mu^\beta(r)\partial_i\mu^\gamma(r) + \mu^\gamma(r)\partial_i\mu^\beta(r)\partial_i\mu^\alpha(r)], \quad (4.1)$$

onde definimos $\partial_i = \partial/\partial\eta_i$, sendo η_i uma coordenada espacial, e os parâmetros α, β e γ são reais, obedecendo ao seguinte vínculo,

$$\alpha + \beta + \gamma = -1. \quad (4.2)$$

O conjunto desses três valores reais, obedecendo à condição acima, cha-

mos de parametrização ou mais adequadamente ordenamento. Podemos perceber facilmente que podem existir vários tipos de parametrizações. Em nosso trabalho utilizaremos uma parametrização particular, a parametrização proposta por Mustafa e Mazharimousavi [1], que é,

$$\alpha = -\frac{1}{4}, \quad \beta = -\frac{1}{2}, \quad \gamma = -\frac{1}{4}, \quad (4.3)$$

assim substituindo estes valores na expressão (4.1) temos,

$$\mathcal{H}_0 = -\mu^{-\frac{1}{4}}(r)\partial_i\mu^{-\frac{1}{2}}(r)\partial_i\mu^{-\frac{1}{4}}(r), \quad (4.4)$$

aqui vamos definir a notação para $\mu^{-\frac{1}{2}}(r)$, já que este objeto aparecerá diversas vezes em nosso trabalho,

$$\mu^{-\frac{1}{2}}(r) = \mathcal{M}. \quad (4.5)$$

Então, utilizando esta nova notação, reescrevemos o Hamiltoniano como,

$$\mathcal{H}_0 = -\sqrt{\mathcal{M}}\partial_i\mathcal{M}\partial_i\sqrt{\mathcal{M}} \quad (4.6)$$

Vamos colocar o nosso Hamiltoniano em uma forma bidimensional, em coordenadas cartesianas, e atuando em um espinor ψ ,

$$\mathcal{H}_0\psi = -\sqrt{\mathcal{M}}\left(\partial_x\mathcal{M}\partial_x\sqrt{\mathcal{M}}\psi + \partial_y\mathcal{M}\partial_y\sqrt{\mathcal{M}}\psi\right). \quad (4.7)$$

Começando pelo termo $\partial_x\sqrt{\mathcal{M}}\psi$, e usando a transformação de coordenadas (3.9) temos,

$$\begin{aligned} \partial_x\sqrt{\mathcal{M}}\psi &= \sqrt{\mathcal{M}}\left(\cos\theta\partial_r\psi - \frac{1}{r}\sin\theta\partial_\theta\psi\right) + \\ &+ \psi\left(\cos\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}} - \frac{1}{r}\sin\theta\partial_\theta\sqrt{\mathcal{M}}\right) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Sabendo-se que $\partial_\theta\sqrt{\mathcal{M}} = 0$, então a nossa expressão toma a seguinte forma,

$$\partial_x\sqrt{\mathcal{M}}\psi = \sqrt{\mathcal{M}}\cos\theta\partial_r\psi - \sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\sin\theta\partial_\theta\psi + \psi\cos\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}}, \quad (4.9)$$

avançando mais na determinação dos termos, vamos tratar agora a seguinte expressão (utilizando o resultado acima),

$$\begin{aligned} \partial_x(\mathcal{M}\partial_x\sqrt{\mathcal{M}}\psi) &= \partial_x\left(\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\cos\theta\partial_r\psi\right) - \partial_x\left(\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\sin\theta\partial_\theta\psi\right) \\ &+ \partial_x\left(\mathcal{M}\psi\cos\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}}\right). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Calculando as parcelas separadamente, temos para a primeira parcela,

$$\begin{aligned} \partial_x\left(\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\cos\theta\partial_r\psi\right) &= \cos\theta(\partial_r\mathcal{M})\sqrt{\mathcal{M}}\cos\theta\partial_r\psi + \cos\theta\mathcal{M}(\partial_r\sqrt{\mathcal{M}})\cos\theta\partial_r\psi \\ &+ \cos\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\cos\theta\partial_r^2\psi - \frac{1}{r}\sin\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}(\partial_\theta\cos\theta)\partial_r\psi \\ &- \frac{1}{r}\sin\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\cos\theta\partial_\theta\partial_r\psi, \end{aligned} \quad (4.11)$$

para a segunda,

$$\begin{aligned} \partial_x\left(\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\sin\theta\partial_\theta\psi\right) &= \cos\theta(\partial_r\mathcal{M})\sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\sin\theta\partial_\theta\psi + \cos\theta\mathcal{M}(\partial_r\sqrt{\mathcal{M}})\frac{1}{r}\sin\theta\partial_\theta\psi \\ &- \cos\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\sin\theta\left(\frac{1}{r^2}\right)\partial_\theta\psi + \cos\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\sin\theta\partial_r\partial_\theta\psi \\ &- \frac{1}{r^2}\sin\theta(\partial_\theta\sin\theta)\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\partial_\theta\psi - \frac{1}{r}\sin\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\sin\theta \\ &\partial_\theta^2\psi, \end{aligned} \quad (4.12)$$

e para a terceira parcela,

$$\begin{aligned} \partial_x\left(\mathcal{M}\psi\cos\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}}\right) &= \cos\theta(\partial_r\mathcal{M})\psi\cos\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}} + \cos\theta\mathcal{M}\partial_r\psi\cos\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}} \\ &+ \cos\theta\mathcal{M}\psi\cos\theta\partial_r^2\sqrt{\mathcal{M}} - \frac{1}{r}\sin\theta\mathcal{M}(\partial_\theta\psi)\cos\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}} \\ &- \frac{1}{r}\sin\theta\mathcal{M}\psi(\partial_\theta\cos\theta)\partial_r\sqrt{\mathcal{M}} - \frac{1}{r}\sin\theta\mathcal{M}\psi\cos\theta\partial_\theta \\ &(\partial_r\sqrt{\mathcal{M}}). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Agora vamos tratar a parte da expressão (4.7) em y , ou seja, $\partial_y\sqrt{\mathcal{M}}\psi = \sqrt{\mathcal{M}}\partial_y\psi + \psi\partial_y\sqrt{\mathcal{M}}$. Usando novamente a transformação de coordenadas (3.9) temos,

$$\partial_y\sqrt{\mathcal{M}}\psi = \sqrt{\mathcal{M}}\sin\theta\partial_r\psi + \sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\cos\theta\partial_\theta\psi + \psi\sin\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}} \quad (4.14)$$

tratando a seguinte expressão, em analogia com o que já fizemos para a parte em x ,

$$\begin{aligned}\partial_y(\mathcal{M}\partial_y\sqrt{\mathcal{M}}\psi) &= \partial_y\left(\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\sin\theta\partial_r\psi\right) + \partial_y\left(\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\cos\theta\partial_\theta\psi\right) \\ &\quad + \partial_y\left(\mathcal{M}\psi\sin\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}}\right)\end{aligned}\quad (4.15)$$

Novamente, vamos determinar separadamente cada uma das três parcelas acima, a primeira parcela é,

$$\begin{aligned}\partial_y\left(\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\sin\theta\partial_r\psi\right) &= \sin\theta(\partial_r\mathcal{M})\sqrt{\mathcal{M}}\sin\theta\partial_r\psi + \sin\theta\mathcal{M}(\partial_r\sqrt{\mathcal{M}})\sin\theta\partial_r\psi \\ &\quad + \sin\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\sin\theta\partial_r^2\psi + \frac{1}{r}\cos\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}(\partial_\theta\sin\theta)\partial_r\psi \\ &\quad + \frac{1}{r}\cos\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\sin\theta\partial_\theta\partial_r\psi,\end{aligned}\quad (4.16)$$

a segunda,

$$\begin{aligned}\partial_y\left(\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\cos\theta\partial_\theta\psi\right) &= \sin\theta(\partial_r\mathcal{M})\sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\cos\theta\partial_\theta\psi + \sin\theta\mathcal{M}(\partial_r\sqrt{\mathcal{M}})\frac{1}{r}\cos\theta\partial_\theta\psi \\ &\quad - \sin\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\cos\theta\left(\frac{1}{r^2}\right)\partial_\theta\psi + \sin\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\cos\theta\partial_r\partial_\theta\psi \\ &\quad + \frac{1}{r^2}\cos\theta(\partial_\theta\cos\theta)\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\partial_\theta\psi + \frac{1}{r}\cos\theta\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}\frac{1}{r}\cos\theta \\ &\quad \partial_\theta^2\psi,\end{aligned}\quad (4.17)$$

e finalmente a terceira parcela é escrita como,

$$\begin{aligned}\partial_y\left(\mathcal{M}\psi\sin\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}}\right) &= \sin\theta(\partial_r\mathcal{M})\psi\sin\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}} + \sin\theta\mathcal{M}\partial_r\psi\sin\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}} \\ &\quad + \sin\theta\mathcal{M}\psi\sin\theta\partial_r^2\sqrt{\mathcal{M}} + \frac{1}{r}\cos\theta\mathcal{M}(\partial_\theta\psi)\sin\theta\partial_r\sqrt{\mathcal{M}} \\ &\quad + \frac{1}{r}\cos\theta\mathcal{M}\psi(\partial_\theta\sin\theta)\partial_r\sqrt{\mathcal{M}} + \frac{1}{r}\cos\theta\mathcal{M}\psi\sin\theta\partial_\theta \\ &\quad (\partial_r\sqrt{\mathcal{M}}),\end{aligned}\quad (4.18)$$

reunindo todos estes resultados na expressão (4.7) e simplificando obtemos

uma expressão mais compacta,

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_0\psi = & - \left([\mathcal{M}(\partial_r\mathcal{M}) + \mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}(\partial_r\sqrt{\mathcal{M}}) + \frac{1}{r}\mathcal{M}^2 \right. \\
& + \mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}(\partial_r\sqrt{\mathcal{M}})]\partial_r + [\sqrt{\mathcal{M}}(\partial_r\mathcal{M})(\partial_r\sqrt{\mathcal{M}}) \\
& + \frac{1}{r}\mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}(\partial_r\sqrt{\mathcal{M}}) + \mathcal{M}\sqrt{\mathcal{M}}(\partial_r^2\sqrt{\mathcal{M}})] + \mathcal{M}^2\partial_r^2 \\
& \left. + \frac{1}{r^2}\mathcal{M}^2\partial_\theta^2 \right) \psi.
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Esta expressão será utilizada na próxima subseção, quando calcularemos o comutador do Hamiltoniano com a componente J_z do momento angular total J , agora, trataremos desta expressão de forma a obter dela a componente \mathcal{H}_0 , com a coordenada radial r e a função $\mu(r)$ aparecendo explicitamente.

Calculando as derivadas de \mathcal{M} escrevemos,

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_0\psi = & - \left[\left(-\frac{n}{2r\mu} - \frac{n}{4r\mu} + \frac{1}{r\mu} - \frac{n}{4r\mu} \right) \partial_r + \right. \\
& \left. + \left(\frac{n^2}{8r^2\mu} - \frac{n}{4r^2\mu} + \frac{n(n+4)}{16r^2\mu} \right) + \frac{1}{\mu}\partial_r^2 + \frac{1}{\mu r^2}\partial_\theta^2 \right] \psi,
\end{aligned} \tag{4.20}$$

fazendo mais algumas operações de simplificação é possível encontrarmos uma expressão mais compacta para a componente da diagonal principal do operador Hamiltoniano massa variável,

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{1}{\mu}\partial_r^2 - \frac{(1-n)}{\mu r}\partial_r - \frac{1}{\mu r^2}\partial_\theta^2 - \frac{3n^2/16}{\mu r^2}. \tag{4.21}$$

Agora vamos determinar as componentes \mathcal{H}_{12} e \mathcal{H}_{21} fora da diagonal principal, estas componentes estão relacionadas com a interação SO, vamos começar, como de costume, pela componente \mathcal{H}_{12} , assim,

$$\mathcal{H}_{12} = -\alpha_R(iP_x + P_y), \tag{4.22}$$

aqui, entretanto, devemos utilizar o operador momento definido por Mustafa e Mazharimousavi [1], para sistemas com massa dependente da posição

(PDM), este operador é,

$$P_j = -i \left(\mathcal{M} \partial_j + \frac{1}{2} \partial_j \mathcal{M} \right), \quad (4.23)$$

em coordenadas cartesianas e posteriormente substituindo este operador na componente (4.22), temos,

$$\mathcal{H}_{12} = -\alpha_R \left(\mathcal{M} \partial_x + \frac{1}{2} \partial_x \mathcal{M} \right) + \alpha_{Ri} \left(\mathcal{M} \partial_y + \frac{1}{2} \partial_y \mathcal{M} \right), \quad (4.24)$$

usando a transformação de coordenadas (3.9) obtemos,

$$\mathcal{H}_{12} \psi = -\alpha_R \mathcal{M} e^{-i\theta} \left(\partial_r \psi - \frac{i}{r} \partial_\theta \psi + \frac{1}{2} \frac{\partial_r \mathcal{M}}{\mathcal{M}} \right). \quad (4.25)$$

Vamos procurar obter esta componente de uma forma mais explícita, evidenciando a função $\mu(r)$, como feito anteriormente. A partir de,

$$\frac{n}{r} = \frac{1}{\mu} \frac{d\mu}{dr}, \quad (4.26)$$

e de,

$$\partial_r \mathcal{M} = -\frac{1}{2\mu\sqrt{\mu}} \frac{d\mu}{dr}, \quad (4.27)$$

a equação (4.25) nos fornece então a componente \mathcal{H}_{12} como queremos,

$$\mathcal{H}_{12} = -\frac{\alpha_R e^{-i\theta}}{\sqrt{\mu}} \left(\partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta - \frac{1}{4\mu} \frac{d\mu}{dr} \right). \quad (4.28)$$

Agora, partiremos para a última tarefa desta seção que é determinar a componente \mathcal{H}_{21} ,

$$\mathcal{H}_{21} = \alpha_R (iP_x - P_y), \quad (4.29)$$

usando o operador (4.23) em coordenadas cartesianas escrevemos,

$$\mathcal{H}_{21} = \alpha_R \left(\mathcal{M} \partial_x + \frac{1}{2} \partial_x \mathcal{M} \right) + i\alpha_R \left(\mathcal{M} \partial_y + \frac{1}{2} \partial_y \mathcal{M} \right), \quad (4.30)$$

novamente, aplicando a transformação de coordenadas (3.9) e depois de algumas simplificações encontramos a componente \mathcal{H}_{21} ,

$$\mathcal{H}_{21} = \frac{\alpha_R e^{i\theta}}{\sqrt{\mu}} \left(\partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta - \frac{1}{4\mu} \frac{d\mu}{dr} \right). \quad (4.31)$$

Desta forma concluímos a nossa seção obtendo as quatro componentes do operador Hamiltoniano \mathcal{H} para o caso Rashba, massa variável ($\mathcal{H}_{11} = \mathcal{H}_{22} = \mathcal{H}_0, \mathcal{H}_{12}, \mathcal{H}_{21}$). Na próxima subseção, investigaremos a conservação da componente J_z do operador momento angular J para sistemas quânticos de spin 1/2, submetidos a uma interação SO do tipo Rashba, quando a massa efetiva depende da posição.

4.2.1 Conservação do Momento Angular

Nesta subseção, teremos a importante tarefa de investigar se existe conservação da componente J_z do momento angular total J para sistemas quânticos, com massa dependente da posição radial $\mu(r)$ e submetidos a uma interação SO do tipo Rashba. Primeiro faremos a verificação desta lei de conservação utilizando somente a componente cinética \mathcal{H}_0 do Hamiltoniano total \mathcal{H} , conforme fizemos nos casos anteriores, onde a massa efetiva m^* do sistema era constante. Esta componente \mathcal{H}_0 , proposta inicialmente por von Roos, já foi trabalhada, bem como a questão dos ordenamentos, e para os objetivos da presente subseção, partiremos da expressão (4.19).

Analisando a expressão (4.19), podemos perceber que os coeficientes dos operadores, assim como o termo livre, são funções da coordenada radial r , desta forma, podemos dar um aspecto mais compacto para esta expressão, simplesmente reescrevendo estes coeficientes como funções de r , desta forma, a expressão assume uma forma mais simples,

$$\mathcal{H}_0 = -p(r)\partial_r - q(r) - s(r)\partial_r^2 - u(r)\partial_\theta^2, \quad (4.32)$$

agora temos uma expressão mais cômoda para trabalharmos a comutação com J_z , assim escrevemos,

$$[\mathcal{H}_0, J_z] = [-p(r)\partial_r - q(r) - s(r)\partial_r^2 - u(r)\partial_\theta^2, J_z], \quad (4.33)$$

ou representando J_z em suas duas componentes.

$$[\mathcal{H}_0, L_z + S_z] = -[p(r)\partial_r + q(r) + s(r)\partial_r^2 + u(r)\partial_\theta^2, L_z + S_z]. \quad (4.34)$$

Vamos tratar separadamente as partes dos comutadores em L_z e em S_z , como temos feito até agora, então, começando com a parte do comutador correspondente a L_z temos,

$$[\mathcal{H}_0, L_z] = [p(r)\partial_r, L_z] + [q(r), L_z] + [s(r)\partial_r^2, L_z] + [u(r)\partial_\theta^2, L_z]. \quad (4.35)$$

Novamente podemos utilizar aqui os resultados em (3.31), que são consequências diretas das relações canônicas fundamentais da mecânica quântica, estas relações, depois de substituídas, produzem o seguinte resultado na expressão acima,

$$[\mathcal{H}_0, L_z] = 0. \quad (4.36)$$

Da mesma forma, tratando a parte do comutador correspondente a S_z ,

$$[\mathcal{H}_0, S_z] = [p(r)\partial_r, S_z] + [q(r), S_z] + [s(r)\partial_r^2, S_z] + [u(r)\partial_\theta^2, S_z], \quad (4.37)$$

e ainda utilizando as relações (3.31), temos também,

$$[\mathcal{H}_0, S_z] = 0, \quad (4.38)$$

o que resulta diretamente em,

$$[\mathcal{H}_0, L_z + S_z] = [\mathcal{H}_0, J_z] = 0. \quad (4.39)$$

Desta forma, a componente \mathcal{H}_0 do Hamiltoniano total \mathcal{H} comuta com o operador J_z .

Agora vamos investigar a relação de comutação entre a componente \mathcal{H}_{so} , correspondente à interação spin-órbita, e o operador momento angular total J_z , para sistemas com massa dependente da coordenada radial r e desta

forma confirmar ou não se este comutador se anula. Assim, começamos apresentando a componente \mathcal{H}_{so} na sua forma cartesiana: (vamos utilizar um índice sobrescrito R para indicar que se trata da interação SO tipo Rashba),

$$\mathcal{H}_{so}^R = \alpha_R(P_x\sigma_y - P_y\sigma_x), \quad (4.40)$$

ou em função dos operadores de spin,

$$\mathcal{H}_{so}^R = 2\alpha_R(P_xS_y - P_yS_x) \quad (4.41)$$

lembrando que estamos utilizando a forma (4.23) para o operador momento. Em coordenadas polares a expressão (4.41) fica,

$$\mathcal{H}_{so}^R = -2\alpha_R \left(\frac{\mathcal{M}}{r} S_r L_z - \mathcal{M} S_\theta P_r - \frac{1}{2} S_\theta (P_r \mathcal{M}) \right). \quad (4.42)$$

Vamos separar os termos do comutador, conforme temos feito antes, assim,

$$[\mathcal{H}_{so}^R, J_z] = [\mathcal{H}_{so}^R, L_z] + [\mathcal{H}_{so}^R, S_z], \quad (4.43)$$

começando pela primeira parcela acima, já substituindo a componente \mathcal{H}_{so}^R em coordenadas polares,

$$[\mathcal{H}_{so}^R, L_z] = -2\alpha_R \left[\frac{\mathcal{M}}{r} S_r L_z - \mathcal{M} S_\theta P_r - \frac{1}{2} S_\theta (P_r \mathcal{M}), L_z \right], \quad (4.44)$$

separando os termos do comutador,

$$[\mathcal{H}_{so}^R, L_z] = -2\alpha_R \left(\left[\frac{\mathcal{M}}{r} S_r L_z, L_z \right] - [\mathcal{M} S_\theta P_r, L_z] - \left[\frac{1}{2} S_\theta (P_r \mathcal{M}), L_z \right] \right), \quad (4.45)$$

vamos calcular separadamente cada parcela da expressão anterior. A primeira resulta em,

$$\left[\frac{\mathcal{M}}{r} S_r L_z, L_z \right] = \frac{\mathcal{M}}{r} [S_r, L_z] L_z + \left[\frac{\mathcal{M}}{r}, L_z \right] L_z S_r, \quad (4.46)$$

enquanto que a segunda parcela é,

$$[\mathcal{M}S_\theta P_r, L_z] = \mathcal{M}S_\theta[P_r, L_z] + \mathcal{M}[S_\theta, L_z]P_r + \mathcal{M}[P_r, L_z]S_\theta \quad (4.47)$$

$$+ [\mathcal{M}, L_z]P_r S_\theta,$$

e finalmente a terceira parcela vale,

$$\left[\frac{1}{2}S_\theta(P_r\mathcal{M}), L_z \right] = \frac{1}{2}S_\theta[(P_r\mathcal{M}), L_z] + \frac{1}{2}[S_\theta, L_z](P_r\mathcal{M}). \quad (4.48)$$

Agora vamos analisar o termo $[\mathcal{H}_{so}^R, S_z]$, fazendo as mesmas substituições anteriores, temos,

$$[\mathcal{H}_{so}^R, S_z] = -2\alpha_R \left[\frac{\mathcal{M}}{r}S_r L_z - \mathcal{M}S_\theta P_r - \frac{1}{2}S_\theta(P_r\mathcal{M}), S_z \right], \quad (4.49)$$

Usando propriedade dos comutadores e separando os termos, temos,

$$[\mathcal{H}_{so}^R, S_z] = -2\alpha_R \left(\left[\frac{\mathcal{M}}{r}S_r L_z, S_z \right] - [\mathcal{M}S_\theta P_r, S_z] - \left[\frac{1}{2}S_\theta(P_r\mathcal{M}), S_z \right] \right), \quad (4.50)$$

Vamos calcular separadamente as parcelas acima, a primeira parcela é,

$$\left[\frac{\mathcal{M}}{r}S_r L_z, S_z \right] = \frac{\mathcal{M}}{r}S_r[L_z, S_z] + \frac{\mathcal{M}}{r}[S_r, S_z]L_z + \frac{\mathcal{M}}{r}[L_z, S_z]S_r$$

$$+ \left[\frac{\mathcal{M}}{r}, S_z \right]L_z S_r, \quad (4.51)$$

a segunda parcela vale,

$$[\mathcal{M}S_\theta P_r, S_z] = \mathcal{M}(S_\theta[P_r, S_z] + [S_\theta, S_z]P_r + [P_r, S_z]S_\theta) + [\mathcal{M}, S_z]P_r S_\theta, \quad (4.52)$$

e finalmente a terceira parcela,

$$\frac{1}{2}[S_\theta(P_r\mathcal{M}), S_z] = \frac{1}{2}S_\theta[(P_r\mathcal{M}), S_z] + \frac{1}{2}[S_\theta, S_z](P_r\mathcal{M}). \quad (4.53)$$

Juntando todas as contribuições e lembrando que $[\mathcal{H}_{so}^R, J_z] = [\mathcal{H}_{so}^R, L_z] + [\mathcal{H}_{so}^R, S_z]$ podemos utilizar os resultados vistos em (3.31), após a utilização

destes, a respectiva expressão se reduz a,

$$[\mathcal{H}_{so}^R, J_z] = -2\alpha_R \left(\frac{\mathcal{M}}{r} [S_r, L_z] L_z - \mathcal{M} [S_\theta, L_z] P_r - \frac{1}{2} [S_\theta, L_z] (P_r \mathcal{M}) + \frac{\mathcal{M}}{r} [S_r, S_z] L_z - \mathcal{M} [S_\theta, S_z] P_r - \frac{1}{2} [S_\theta, S_z] (P_r \mathcal{M}) \right). \quad (4.54)$$

Nesta expressão, podemos identificar facilmente as relações canônicas fundamentais do momento angular, que neste caso são,

$$[S_\theta, S_z] = iS_r, \quad (4.55)$$

$$[S_r, S_z] = -iS_\theta, \quad (4.56)$$

e também as seguintes relações definidas abaixo, que já foram vistas em (3.48), relembrando,

$$[S_\theta, L_z] = -iS_r, \quad (4.57)$$

$$[S_r, L_z] = iS_\theta. \quad (4.58)$$

Deste modo, a substituição destas relações nos leva a ter o seguinte resultado,

$$[\mathcal{H}_{so}^R, J_z] = -2\alpha_R \left(\frac{\mathcal{M}}{r} iS_\theta L_z + \mathcal{M} iS_r P_r + \frac{1}{2} iS_r (P_r \mathcal{M}) - \frac{\mathcal{M}}{r} iS_\theta L_z - \mathcal{M} iS_r P_r - \frac{1}{2} iS_r (P_r \mathcal{M}) \right). \quad (4.59)$$

Cancelando os termos simétricos, temos finalmente,

$$[\mathcal{H}_{so}^R, J_z] = 0, \quad (4.60)$$

que é a representação matemática da conservação da componente J_z do momento angular total, para sistemas quânticos com massa dependente da coordenada radial r , submetidos a um interação spin-órbita do tipo Rashba. Assim, este era o resultado que procurávamos quando iniciamos esta subseção, a verificação desta importante lei de conservação para o presente caso.

4.2.2 Sistema de Equações Acopladas

Esta subseção será dedicada à tarefa de encontrar um sistema de equações acopladas para o presente caso, onde a partícula de spin 1/2 possui sua massa efetiva dependente da posição radial $\mu(r)$, tal que $\mu(r) = \mu_1 r^n$, sendo μ_1 uma constante real (o valor de n será fixado posteriormente), também tal partícula está submetida a uma interação SO do tipo Rashba. Este sistema de equações será obtido de maneira análoga àquela empregada no capítulo 3. Partimos do nosso conhecido problema de autovalor,

$$H\psi(r, \theta) = E\psi(r, \theta), \quad (4.61)$$

onde a autofunção $\psi(r, \theta)$ é um bi-espinor dado por (3.51).

Baseado nos resultados da seção anterior, podemos inferir um bi-espinor tentativa para o nosso problema de autovalor, assim, tomamos para o nosso ansatz ψ ,

$$\psi(r, \theta) = \begin{pmatrix} a_k f(r) e^{i(m-\frac{1}{2})\theta} \\ b_k g(r) e^{i(m+\frac{1}{2})\theta} \end{pmatrix}, \quad (4.62)$$

onde a_k e b_k são constantes arbitrárias, m é o número quântico momento angular e as funções radiais são representadas por $f(r)$ e $g(r)$. Prosseguindo, temos uma equação matricial com a forma (3.52), de onde tiraremos o nosso sistema de equações acopladas. Assim a nossa primeira equação do sistema é,

$$\mathcal{H}_{11} a_k f(r) e^{i(m-\frac{1}{2})\theta} + \mathcal{H}_{12} b_k g(r) e^{i(m+\frac{1}{2})\theta} = E a_k f(r) e^{i(m-\frac{1}{2})\theta}, \quad (4.63)$$

substituindo as componentes \mathcal{H}_{11} e \mathcal{H}_{12} calculadas na seção (4.2) teremos,

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{\mu} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{(1-n)}{\mu r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{\mu r^2} \left(m - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{3n^2/16}{\mu r^2} - E \right) a_k f(r) = \\ & = -\frac{\alpha_R b_k}{\sqrt{\mu}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{1}{4\mu} \frac{d\mu}{dr} + \frac{1}{r} \left(m + \frac{1}{2} \right) \right) g(r). \end{aligned} \quad (4.64)$$

Aqui, vamos fixar um valor para n , então escolhendo $n = 2$, temos depois de algumas simplificações, a nossa primeira equação do sistema, que se apresenta como,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{2} - m^2 + m \right] + \mu E \right) f(r) = \frac{\alpha_R b_k \sqrt{\mu}}{a_k} \left(\frac{d}{dr} + \frac{m}{r} \right) g(r). \quad (4.65)$$

Para obtermos a segunda equação do sistema, usaremos a mesma técnica partindo de,

$$\mathcal{H}_{21} a_k f(r) e^{i(m-\frac{1}{2})\theta} + \mathcal{H}_{22} b_k g(r) e^{i(m+\frac{1}{2})\theta} = E b_k g(r) e^{i(m+\frac{1}{2})\theta}, \quad (4.66)$$

substituindo as componentes \mathcal{H}_{21} e \mathcal{H}_{22} , encontramos,

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{\mu} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{(1-n)}{\mu r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{\mu r^2} \left(m + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{3n^2/16}{\mu r^2} - E \right) b_k g(r) = \\ & = \frac{\alpha_R a_k}{\sqrt{\mu}} \left(\frac{d}{dr} - \frac{1}{4\mu} \frac{d\mu}{dr} - \frac{1}{r} \left(m - \frac{1}{2} \right) \right) f(r). \end{aligned} \quad (4.67)$$

No caso especial onde $n = 2$ obtemos a nossa segunda equação,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{2} - m^2 - m \right] + \mu E \right) g(r) = \frac{\alpha_R a_k \sqrt{\mu}}{b_k} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{m}{r} \right) f(r). \quad (4.68)$$

Assim, obtemos um sistema de equações diferenciais acopladas de segunda ordem, de onde poderemos determinar as funções radiais $f(r)$ e $g(r)$ (já que a parte angular foi descartada nas exponenciais), para tal, buscaremos uma forma de desacoplar este sistema. A próxima subseção será dedicada a esta tarefa.

4.2.3 Autofunções

Começaremos esta subseção nos perguntando: como poderíamos desacoplar e resolver o sistema proposto na subseção anterior? Na ocasião em que resolvemos o sistema para o caso da partícula possuindo massa efetiva constante,

assim como estando submetida a uma interação SO, utilizamos duas importantes relações provenientes da teoria das funções de Bessel, as relações (3.59) e (3.67), que relacionavam duas funções de Bessel de ordem inteira, diferindo apenas por uma unidade — de fato esta identidade é válida não apenas para as funções de Bessel comuns J mas para todas elas: modificadas, de Hankel, de Neumann e assim por diante. Logo, tivemos sucesso em desacoplar aquele sistema, e resolver as equações separadamente, entretanto, poderíamos estar tentados a utilizar o mesmo método aqui, ou outro similar, acontece que não sabemos de antemão se as equações deste novo sistema podem ser reformuladas através de alguma técnica, para equações do tipo Bessel, e se for o caso, ainda não poderemos garantir que as ordens das funções envolvidas difiram por uma unidade. No caso disto acontecer teremos um problema, já que não conhecemos na literatura quaisquer relações de recorrência que relacionem funções de Bessel de ordem não inteira. Também existe a chance deste sistema estar associado a outros tipos de equações diferenciais como equações de Laguerre, Hipergeométricas e outras. Assim, vamos tentar propor uma outra abordagem para desacoplar e resolver este sistema. A primeira equação deste sistema é,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{2} - m^2 + m \right] + \mu E \right) f(r) = \frac{\alpha_R b_k \sqrt{\mu}}{a_k} \left(\frac{d}{dr} + \frac{m}{r} \right) g(r), \quad (4.69)$$

e a segunda equação é,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{2} - m^2 - m \right] + \mu E \right) g(r) = \frac{\alpha_R a_k \sqrt{\mu}}{b_k} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{m}{r} \right) f(r), \quad (4.70)$$

fazendo uma substituição de variável $z = \gamma r^2$, onde γ é uma constante complexa, e usando a regra da cadeia, temos para a derivada primeira,

$$\frac{d}{dr} = \frac{dz}{dr} \frac{d}{dz}, \quad (4.71)$$

e para a derivada segunda,

$$\frac{d^2}{dr^2} = \frac{d}{dz} \left(\frac{d^2 z}{dr^2} \right) + \left(\frac{dz}{dr} \right)^2 \frac{d^2}{dz^2}. \quad (4.72)$$

A função massa $\mu(r)$, após a mudança de variável, fica sendo,

$$\mu(r) = \mu_1 r^2 \rightarrow \mu(z) = \frac{\mu_1 z}{\gamma}. \quad (4.73)$$

Assim, depois de algumas operações, temos a equação (4.69) na variável z ,

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{(1/2 - m^2)}{4z^2} + \frac{\mu_1 E}{4\gamma^2} \right) f(z) + \frac{m}{4z^2} f(z) = \frac{\alpha_R b_k \sqrt{\mu_1}}{4\gamma a_k} \left(2 \frac{d}{dz} + \frac{m}{z} \right) g(z). \quad (4.74)$$

Tratando agora a equação (4.70) e fazendo as mesmas transformações feitas na equação anterior, temos esta equação também na variável z , que é,

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{(1/2 - m^2)}{4z^2} + \frac{\mu_1 E}{4\gamma^2} \right) g(z) - \frac{m}{4z^2} g(z) = \frac{\alpha_R a_k \sqrt{\mu_1}}{4\gamma b_k} \left(-2 \frac{d}{dz} + \frac{m}{z} \right) f(z). \quad (4.75)$$

Agora vamos adicionar e subtrair as equações (4.74) e (4.75) deste novo sistema, adicionando as equações temos,

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{(1/2 - m^2)}{4z^2} + \frac{\mu_1 E}{4\gamma^2} \right) [f(z) + g(z)] + \frac{m}{4z^2} [f(z) - g(z)] = \\ & = \frac{\alpha_R \sqrt{\mu_1}}{4\gamma} \left[2 \frac{b_k}{a_k} \left(\frac{d}{dz} + \frac{m}{2z} \right) g(z) + 2 \frac{a_k}{b_k} \left(-\frac{d}{dz} + \frac{m}{2z} \right) f(z) \right]. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Introduzindo novas definições para a soma e a subtração das funções radiais,

$$F(z) = f(z) + g(z) \quad (4.77)$$

$$G(z) = f(z) - g(z),$$

reescrevemos a equação (4.76) em termos de F e G ,

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{(1/2 - m^2)}{4z^2} + \frac{\mu_1 E}{4\gamma^2} \right) F(z) + \frac{m}{4z^2} G(z) = \\ & = -\frac{\alpha_R \sqrt{\mu_1}}{4\gamma} \left[\left(\frac{a_k}{b_k} - \frac{b_k}{a_k} \right) F'(z) + \left(\frac{a_k}{b_k} + \frac{b_k}{a_k} \right) G'(z) \right. \\ & \quad \left. - \frac{m}{2z} \left[\left(\frac{a_k}{b_k} + \frac{b_k}{a_k} \right) F(z) + \left(\frac{a_k}{b_k} - \frac{b_k}{a_k} \right) G(z) \right] \right]. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Que é a soma das equações (4.74) e (4.75). Subtraindo estas equações e utilizando as relações (4.77) encontramos,

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{(1/2 - m^2)}{4z^2} + \frac{\mu_1 E}{4\gamma^2} \right) G(z) + \frac{m}{4z^2} F(z) = \\ & = \frac{\alpha_R \sqrt{\mu_1}}{4\gamma} \left[\left(\frac{a_k}{b_k} - \frac{b_k}{a_k} \right) G'(z) + \left(\frac{a_k}{b_k} + \frac{b_k}{a_k} \right) F'(z) \right. \\ & \quad \left. - \frac{m}{2z} \left[\left(\frac{a_k}{b_k} + \frac{b_k}{a_k} \right) G(z) + \left(\frac{a_k}{b_k} - \frac{b_k}{a_k} \right) F(z) \right] \right]. \end{aligned} \quad (4.79)$$

Assim, temos finalmente a subtração das equações (4.74) e (4.75), a partir de agora possuímos mais um sistema modificado, formado pelas equações (4.78) e (4.79). Esta equação pode ser reescrita de modo que possamos aplicar uma metodologia parecida com aquela do caso de massa constante. Para isso precisamos escolher convenientemente as constantes arbitrárias a_k e b_k , ou seja,

$$b_k = ia_k. \quad (4.80)$$

Com esta escolha das constantes a_k e b_k obtemos uma equação bastante parecida com aquela que tratamos no capítulo 3,

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \frac{d}{dz} + \frac{1}{4} \left[\frac{1/2 - m^2}{z^2} - \frac{4E}{\alpha_R^2} \right] \right) F(z) = -\frac{m}{2z} \left(1 + \frac{1}{2z} \right) G(z) \quad (4.81)$$

vale comentar que agora passamos a considerar,

$$\gamma = \frac{i\alpha_R \sqrt{\mu_1}}{2}. \quad (4.82)$$

Tratando a equação (4.79) da mesma forma e considerando a relação (4.80) entre as constantes arbitrárias, usando (4.82) obtemos,

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{d}{dz} + \frac{1}{4} \left[\frac{1/2 - m^2}{z^2} - \frac{4E}{\alpha_R^2} \right] \right) G(z) = \frac{m}{2z} \left(1 - \frac{1}{2z} \right) F(z). \quad (4.83)$$

Note que o sistema de equações diferenciais acopladas composto pelas equações (4.78) e (4.79) se parece com o sistema estudado no capítulo 3. Naquele capítulo a abordagem utilizada por Bulgakov e Sadreev [30] foi de introduzir funções de Bessel de ordens m e $m + 1$, com m inteiro, e usar as identidades (3.59) e (3.67). Desta forma o sistema poderia ser desacoplado e as equações resolvidas facilmente. Neste capítulo essa abordagem não é suficiente para desacoplar as equações como veremos em seguida.

Ainda podemos fazer uma última transformação no sistema acima, utilizando as seguintes relações,

$$F(z) = e^{z/2} \sqrt{z} A(z) \quad (4.84)$$

$$G(z) = e^{-z/2} \sqrt{z} B(z), \quad (4.85)$$

as derivadas primeira e segunda destas funções podem ser calculadas facilmente e substituindo-as na equação acima obtemos,

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} - \frac{1}{4} \left(1 + \frac{4E}{\alpha_R^2} + \frac{1/2 + m^2}{z^2} \right) \right] A(z) = -\frac{me^{-z}}{2z} \left(1 + \frac{1}{2z} \right) B(z), \quad (4.86)$$

da mesma maneira derivamos $G(z)$ e escrevemos a segunda equação como,

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} - \frac{1}{4} \left(1 + \frac{4E}{\alpha_R^2} + \frac{1/2 + m^2}{z^2} \right) \right] B(z) = \frac{me^z}{2z} \left(1 - \frac{1}{2z} \right) A(z). \quad (4.87)$$

Introduzindo a notação muito comum na teoria das funções de Bessel,

$$\nabla_\nu = \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + k^2 - \frac{\nu_m^2}{z^2}, \quad (4.88)$$

que pode ser aplicada no sistema de equações acima se considerarmos as seguintes correspondências,

$$k^2 = -\frac{1}{4} - \frac{E}{\alpha_R^2}, \quad (4.89)$$

e

$$\nu_m^2 = \frac{m^2 + 1/2}{4}, \quad (4.90)$$

o nosso sistema de equações é escrito como,

$$\begin{cases} \nabla_\nu A(z) = -\frac{me^{-z}}{2z} \left(1 + \frac{1}{2z}\right) B(z) \\ \nabla_\nu B(z) = \frac{me^z}{2z} \left(1 - \frac{1}{2z}\right) A(z). \end{cases} \quad (4.91)$$

Este é um sistema de equações diferenciais acopladas, do tipo Bessel *não-homogêneas*. Nossa tarefa a partir deste ponto será atacar este sistema de equações, para tentar desacoplá-las, obtendo posteriormente as funções $A(z)$ e $B(z)$, de onde poderemos tirar as nossas funções radiais $f(r)$ e $g(r)$. Consideremos dois casos em separado, o primeiro onde $m = 0$ e o segundo onde $m \neq 0$.

Caso para $m = 0$:

Neste caso, aparentemente mais simples, temos o seguinte sistema à disposição,

$$\begin{aligned} \nabla_\nu A(z) &= 0 \\ \nabla_\nu B(z) &= 0, \end{aligned} \quad (4.92)$$

é fácil perceber que o respectivo sistema se desacopla para $m = 0$ e se transforma em duas equações de Bessel homogêneas de primeira espécie, de ordem $\nu_0 = \frac{1}{\sqrt{8}}$. As soluções neste caso são bem-conhecidas e escritas como,

$$A_0(z) = c_1 J_{\nu_0}(kz) + c_2 J_{-\nu_0}(kz), \quad (4.93)$$

e

$$B_0(z) = d_1 J_{\nu_0}(kz) + d_2 J_{-\nu_0}(kz). \quad (4.94)$$

Agora que já conhecemos as funções $A_0(z)$ e $B_0(z)$, podemos retornar para as autofunções radiais $f(z)$ e $g(z)$, para o caso $m = 0$. O cálculo é simples e as autofunções radiais são,

$$f_0(z) = \frac{\sqrt{z}}{2} [(c_1 e^{z/2} + d_1 e^{-z/2}) J_{\nu_0}(kz) + (c_2 e^{z/2} + d_2 e^{-z/2}) J_{-\nu_0}(kz)], \quad (4.95)$$

e

$$g_0(z) = \frac{\sqrt{z}}{2} [(c_1 e^{z/2} - d_1 e^{-z/2}) J_{\nu_0}(kz) + (c_2 e^{z/2} - d_2 e^{-z/2}) J_{-\nu_0}(kz)], \quad (4.96)$$

onde k e ν_0 são dados pelas equações (4.89) e (4.90) respectivamente e c_1, c_2, d_1 e d_2 são constantes arbitrárias.

Caso para $m \neq 0$.

Neste caso, as equações são não-homogêneas, a solução geral deve ser escrita como a soma da solução homogênea mais uma solução particular. A solução para as equações homogêneas são simplesmente,

$$A_m^h(z) = c_{1m} J_{\nu_m}(kz) + c_{2m} J_{-\nu_m}(kz), \quad (4.97)$$

e

$$B_m^h(z) = d_{1m} J_{\nu_m}(kz) + d_{2m} J_{-\nu_m}(kz). \quad (4.98)$$

Retornando para as funções radiais, obtemos,

$$f_m^h(z) = \frac{\sqrt{z}}{2} [(c_{1m} e^{z/2} + d_{1m} e^{-z/2}) J_{\nu_m}(kz) + (c_{2m} e^{z/2} + d_{2m} e^{-z/2}) J_{-\nu_m}(kz)], \quad (4.99)$$

e

$$g_m^h(z) = \frac{\sqrt{z}}{2} [(c_{1m} e^{z/2} - d_{1m} e^{-z/2}) J_{\nu_m}(kz) + (c_{2m} e^{z/2} - d_{2m} e^{-z/2}) J_{-\nu_m}(kz)], \quad (4.100)$$

onde novamente k e ν_m são dados pelas equações (4.89) e (4.90) respectivamente e c_{1m}, c_{2m}, d_{1m} e d_{2m} são constantes arbitrárias.

Para a busca por soluções particulares devemos lembrar que estamos lidando com um sistema de equações de Bessel não-homogêneas e ainda, temos uma função transcendental do lado direito das equações. Uma abordagem seria expandir em série de Taylor esta função exponencial e trabalhar separadamente com os seus termos, resolvendo as equações ordem-a-ordem. Considere a primeira equação do sistema,

$$\nabla_\nu A(z) = -\frac{mB(z)}{4z^2} - \frac{mB(z)}{4z} + \frac{3mB(z)}{8} - \frac{5zmB(z)}{24} - \dots, \quad (4.101)$$

vamos nos ater aos três primeiros termos desta série, definindo,

$$P_{-2}(z) = -\frac{1}{4z^2}, \quad P_{-1}(z) = -\frac{1}{4z}, \quad P_0(z) = \frac{3}{8}. \quad (4.102)$$

Expandindo a segunda equação do sistema em série de Taylor,

$$\nabla_\nu B(z) = -\frac{mA(z)}{4z^2} + \frac{mA(z)}{4z} + \frac{3mA(z)}{8} + \frac{5zmA(z)}{24} + \dots, \quad (4.103)$$

como no caso anterior, nomeando os três primeiros termos, por conveniência,

$$P'_{-2}(z) = P_{-2}(z) = -\frac{1}{4z^2}, \quad (4.104)$$

$$P'_{-1}(z) = -P_{-1}(z) = \frac{1}{4z}, \quad (4.105)$$

$$P'_0(z) = P_0(z) = \frac{3}{8}, \quad (4.106)$$

o que nos permite reescrever o sistema (4.91) em uma forma mais compacta,

$$\begin{cases} \nabla_\nu A(z) = mP_i(z)B(z) \\ \nabla_\nu B(z) = (-1)^i mP_i(z)A(z). \end{cases} \quad (4.107)$$

É importante observar que ao expandir o sistema (4.91) em série de Taylor, cada termo desta expansão pode produzir uma solução particular, assim

podemos trabalhar com cada termo em separado e analisar a sua solução. Posteriormente combinaremos todas essas soluções para compor a solução particular geral, já que propriedades de linearidade do sistema de equações nos permitem fazer isto. Portanto, vamos trabalhar com os três primeiros termos em separado, encontrar a solução do sistema para cada um deles e depois combiná-las, comecemos então pelo termo $P_0(z)$.

Solução para $P_0(z)$.

Substituindo este termo em (4.107), temos o seguinte sistema simples,

$$\begin{cases} \nabla_\nu A(z) = \frac{3}{8}mB(z) \\ \nabla_\nu B(z) = \frac{3}{8}mA(z) \end{cases},$$

adicionando as equações do sistema acima,

$$\nabla_\nu[A(z) + B(z)] = \frac{3}{8}m[A(z) + B(z)], \quad (4.108)$$

e subtraindo estas mesmas equações,

$$\nabla_\nu[A(z) - B(z)] = -\frac{3}{8}m[A(z) - B(z)], \quad (4.109)$$

podemos perceber que o sistema se desacopla,

$$\begin{cases} (\nabla_\nu - \frac{3}{8}m)[A(z) + B(z)] = 0 \\ (\nabla_\nu + \frac{3}{8}m)[A(z) - B(z)] = 0 \end{cases}.$$

Usando a definição para funções de Bessel, vamos reescrever o conteúdo do colchete na primeira equação acima,

$$\nabla_\nu - \frac{3}{8}m = \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + \left(k^2 - \frac{3}{8}m\right) - \frac{\nu_m^2}{z^2}, \quad (4.110)$$

e da mesma forma, a partir da segunda equação,

$$\nabla_\nu + \frac{3}{8}m = \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + \left(k^2 + \frac{3}{8}m\right) - \frac{\nu_m^2}{z^2}, \quad (4.111)$$

o que sugere definirmos novos k'_{\pm} ,

$$k'_{\pm} = \left(k^2 \pm \frac{3}{8}m \right). \quad (4.112)$$

Assim, a solução do sistema (4.110) é imediata, e podemos escrever,

$$A(z) + B(z) = c_1 J_{\nu_m}(k'_- z) \quad (4.113)$$

$$A(z) - B(z) = c_2 J_{\nu_m}(k'_+ z), \quad (4.114)$$

que por sua vez pode ser facilmente resolvido para $A(z)$ e $B(z)$,

$$A_{P_0}(z) = c_I J_{\nu_m}(k'_- z) + c_{II} J_{\nu_m}(k'_+ z) \quad (4.115)$$

$$B_{P_0}(z) = c_{III} J_{\nu_m}(k'_- z) - c_{IV} J_{\nu_m}(k'_+ z), \quad (4.116)$$

onde usaremos um sub-índice P_0 para fazer referência a este termo da expansão e onde c_I, c_{II}, c_{III} e c_{IV} são constantes arbitrárias, assim encontramos as soluções particulares para o caso P_0 .

Solução para P_{-1} .

Substituindo este termo no sistema (4.107),

$$\begin{cases} \nabla_{\nu} A(z) = -\frac{m}{4z} B(z) \\ \nabla_{\nu} B(z) = \frac{m}{4z} A(z) \end{cases},$$

e multiplicando a segunda equação do sistema por i e somando as duas,

$$\nabla_{\nu}[A(z) + iB(z)] = \frac{mi}{4z}[A(z) + iB(z)] \quad (4.117)$$

enquanto que multiplicando a segunda por i e subtraindo-as encontramos,

$$\nabla_{\nu}[A(z) - iB(z)] = -\frac{mi}{4z}[A(z) - iB(z)]. \quad (4.118)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \left(\nabla_{\nu} - \frac{mi}{4z} \right) [A(z) + iB(z)] &= 0 \\ \left(\nabla_{\nu} + \frac{mi}{4z} \right) [A(z) - iB(z)] &= 0, \end{aligned} \quad (4.119)$$

desacoplamos facilmente as equações. Desenvolvendo a primeira equação acima e definindo $\Phi(z) = A(z) + iB(z)$ obtemos,

$$z^2\Phi''(z) + z\Phi'(z) + \left(z^2k^2 - z\frac{mi}{4} - \nu_m^2\right)\Phi(z) = 0, \quad (4.120)$$

cuja solução geral é escrita em termos de uma soma de uma função hipergeométrica confluyente $U(a, b; z)$ e de uma função de Laguerre generalizada $L_a^b(z)$ [33],

$$\Phi(z) = e^{-ikz} z^\nu \{c'_1 U(q, 1 + 2\nu; 2ikz) + c'_2 L_{-q}^{2\nu}(2ikz)\}, \quad (4.121)$$

onde $q = \frac{1}{2} + \frac{m}{8k} + \nu_m$, e c'_1 e c'_2 são constantes arbitrárias. É importante notar que a função hipergeométrica confluyente não é bem definida na origem.

Da mesma forma, desenvolvendo a segunda equação, e definindo $\Omega(z) = A(z) - iB(z)$ temos

$$z^2\Omega''(z) + z\Omega'(z) + \left(z^2k^2 + z\frac{mi}{4} - \nu_m^2\right)\Omega(z) = 0, \quad (4.122)$$

cuja solução também é escrita como uma soma entre as funções especiais $U(a, b; z)$ e $L_a^b(z)$, mas com um parâmetro alterado,

$$\Omega(z) = e^{-ikz} z^\nu \{d'_1 U(q', 1 + 2\nu; 2ikz) + d'_2 L_{-q'}^{2\nu}(2ikz)\}, \quad (4.123)$$

onde $q' = \frac{1}{2} - \frac{m}{8k} + \nu_m$ e d'_1 e d'_2 são constantes arbitrárias.

Assim, de $\Phi(z)$ e $\Omega(z)$ podemos obter facilmente $A(z)$ e $B(z)$ que são escrito como,

$$A_{P-1}(z) = \frac{1}{2} e^{-ikz} z^\nu [c'_2 L_{-q}^{2\nu}(2ikz) + d'_2 L_{-q'}^{2\nu}(2ikz)] \quad (4.124)$$

e

$$B_{P-1}(z) = \frac{-i}{2} e^{-ikz} z^\nu [c'_2 L_{-q}^{2\nu}(2ikz) - d'_2 L_{-q'}^{2\nu}(2ikz)] \quad (4.125)$$

Aqui fizemos as constantes c'_1 e d'_1 iguais a zero, visto que, como mencionado antes, a função hipergeométrica confluyente $U(a, b; z)$ não é bem definida

na origem e portanto pode causar inconvenientes caso queiramos tratar um sistema quântico em alguma região contendo a origem do sistema de coordenadas, como discos e pontos quânticos.

Solução para $P_{-2}(z)$

Substituindo este termo no sistema (4.107), temos,

$$\begin{cases} \nabla_\nu A(z) = -\frac{m}{4z^2}B(z) \\ \nabla_\nu B(z) = -\frac{m}{4z^2}A(z) \end{cases},$$

neste caso a simples multiplicação por um fator adequado e a soma/subtração das equações não as desacopla. O procedimento que utilizamos foi propor uma solução em termos das chamadas séries de Neumann [31, 32],

$$A(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n J_{\gamma+n}(kz) \quad (4.126)$$

$$B(z) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n J_{\gamma+n}(kz), \quad (4.127)$$

substituindo estas séries nas equações anteriores,

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n \nabla_\nu J_{\gamma+n}(kz) = -\frac{m}{4z^2} \sum_{n=0}^{\infty} b_n J_{\gamma+n}(kz) \quad (4.128)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} b_n \nabla_\nu J_{\gamma+n}(kz) = -\frac{m}{4z^2} \sum_{n=0}^{\infty} a_n J_{\gamma+n}(kz),$$

estas duas expressões se simplificam bastante se usarmos a seguinte relação,

$$\nabla_\nu J_{\gamma+n}(kz) = \left(\frac{\gamma^2 - \nu^2}{z^2} \right) J_{\gamma+n}(kz). \quad (4.129)$$

Após substituirmos esta relação e somarmos os membros da expressão resultante, os somatórios são cancelados e uma igualdade mais simples é obtida,

$$\frac{\gamma^2 - \nu^2}{z^2} = \mp \frac{m}{4z^2}, \quad (4.130)$$

de onde obtemos,

$$\gamma = \frac{1}{2}\sqrt{m^2 - m + 1/2}. \quad (4.131)$$

Assim, como estamos procurando soluções particulares basta tomarmos um termo da série de Neumann, como por exemplo aquele onde $n = 0$, ou seja,

$$A_{P-2}(z) = a_0 J_{\gamma_0}(kz) \quad (4.132)$$

$$B_{P-2}(z) = b_0 J_{\gamma_0}(kz). \quad (4.133)$$

Reunindo todas estas soluções, temos finalmente uma solução particular aproximada para o sistema (4.91) para o caso $m \neq 0$,

$$A_m^p(z) \approx A_{P_0}(z) + A_{P-1}(z) + A_{P-2}(z) \quad (4.134)$$

$$B_m^p(z) \approx B_{P_0}(z) + B_{P-1}(z) + B_{P-2}(z), \quad (4.135)$$

Podemos escolher apenas uma parcela das soluções encontradas aqui para os termos da expansão, já que uma parcela também é solução particular, assim, para não complicar e carregar o resultado, usaremos apenas uma parcela destas soluções individuais, logo,

$$A_m^p(z) \approx J_{\nu_m}(k'_- z) + e^{-ikz} z^\nu [L_{-q}^{2\nu}(2ikz) + L_{-q'}^{2\nu}(2ikz)] + J_{\gamma_0}(kz) \quad (4.136)$$

$$B_m^p(z) \approx J_{\nu_m}(k'_+ z) + e^{-ikz} z^\nu [L_{-q}^{2\nu}(2ikz) - L_{-q'}^{2\nu}(2ikz)] + J_{\gamma_0}(kz) \quad (4.137)$$

Aqui escolhemos as constantes c'_2 e d'_2 de tal forma a eliminar os fatores $1/2$ e $-i/2$. As autofunções radiais são, obviamente,

$$f_m(z) = f_m^h(z) + f_m^p(z) \quad (4.138)$$

$$g_m(z) = g_m^h(z) + g_m^p(z), \quad (4.139)$$

ou, com as soluções particulares já incluídas (as soluções homogêneas $f_m^h(z)$ e $g_m^h(z)$ já foram calculadas),

$$f_m(z) = f_m^h(z) + \sqrt{z}e^{z/2}A_m^p(z) \quad (4.140)$$

$$g_m(z) = g_m^h(z) + \sqrt{z}e^{-z/2}B_m^p(z). \quad (4.141)$$

Finalmente, utilizando as componentes radiais acima, escrevemos o nosso espinor solução da equação de autovalor (4.61) que é,

$$\psi(z, \theta) = a_k \begin{pmatrix} f_m(z)e^{i(m-\frac{1}{2})\theta} \\ ig_m(z)e^{i(m+\frac{1}{2})\theta} \end{pmatrix}. \quad (4.142)$$

Vale comentar aqui que utilizamos somente os três primeiros termos da série que resultou da expansão do lado direito do sistema (4.91), isto é, não consideramos os termos $P_1(z) = 5z/24$, $P_2(z) = 7z^2/96$ etc. estes termos produziram outros sistemas de equações que poderiam ser resolvidos usando técnicas particulares, não consideramos estes termos extras, visto que nossas soluções são suficientes para o modelo construído, o valor da constante α_R geralmente é pequeno, e desta forma os termos envolvendo potências mais altas como z , z^2 , z^3 etc. ficariam cada vez mais desprezíveis.

Com as soluções calculadas até agora passamos à análise e apresentação das densidades de probabilidade radiais.

Na figura (4.1) ilustramos, nos quadros superiores os gráficos das densidades de probabilidade radiais dos três primeiros estados com $m = 0$. Os autovalores de energia são 36, 137; 153, 26 e 351, 53, para os estados fundamental, primeiro e segundo excitados respectivamente. $R(r)$ representa $f(r)$ e $g(r)$. As curvas azuis se referem a $r|a_k g(r)|^2$ e as curvas rosas às funções $r|a_k f(r)|^2$, onde $f(r)$ e $g(r)$ são as funções de onda radiais das componentes inferior e superior, respectivamente. Nos quadros inferiores estão plotados os gráficos das densidades de probabilidade radiais completas $r|\psi(r)|^2$, onde

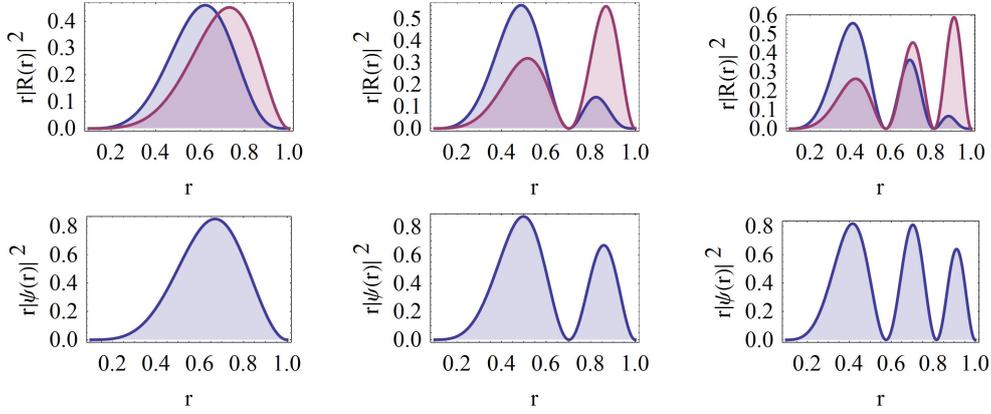


Figura 4.1: Autofunções para $m = 0$. As curvas azul e rosa se referem às componentes superior e inferior, respectivamente, para o caso Rashba. As autofunções de Dresselhaus são invertidas: azul para componente inferior, e rosa para superior.

$|\psi(r)|^2 = |a_k|^2(|f(r)|^2 + |g(r)|^2)$. Utilizando unidades de Rydberg atômicas e $r_i = 0, 1$, $r_e = 1, 0$, $\alpha_R = 0, 125$, $\mu_1 = 1$. Os valores esperados da posição são $\langle r \rangle_f = 0, 600$; $0, 508$; $0, 489$, e $\langle r \rangle_g = 0, 688$; $0, 680$; $0, 677$.

Na figura (4.2) ilustramos, nos quadros superiores os gráficos das densidades de probabilidade radiais dos três primeiros estados com $m = 1$. Os autovalores de energia são $43, 97$; $168, 26$; e $372, 67$, para os estados fundamental, primeiro e segundo excitados respectivamente. $R(r)$ representa $f(r)$ e $g(r)$. As curvas azuis se referem a $r|a_k f(r)|^2$ e as curvas rosas às funções $r|a_k g(r)|^2$, onde $f(r)$ e $g(r)$ são as funções de onda radiais das componentes inferior e superior, respectivamente. Nos quadros inferiores plotamos os gráficos das densidades de probabilidade radiais completas $r|\psi(r)|^2$, onde $|\psi(r)|^2 = |a_k|^2(|f(r)|^2 + |g(r)|^2)$. Utilizando unidades de Rydberg atômicas e $r_i = 0, 1$, $r_e = 1, 0$, $\alpha_R = 0, 125$, $\mu_1 = 1$. Os valores esperados da posição são $\langle r \rangle_f = 0, 783$; $0, 841$; $0, 850$, e $\langle r \rangle_g = 0, 706$; $0, 685$; $0, 679$.

Finalmente, na figura (4.3) nos quadros superiores plotamos os gráficos

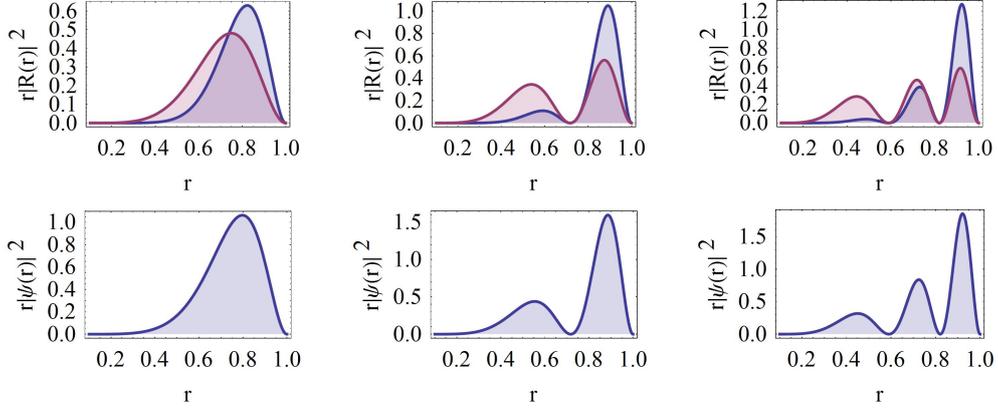


Figura 4.2: Autofunções para $m = 1$. As curvas azul e rosa se referem às componentes superior e inferior, respectivamente, para o caso Rashba. As autofunções de Dresselhaus são invertidas: azul para componente inferior, e rosa para superior.

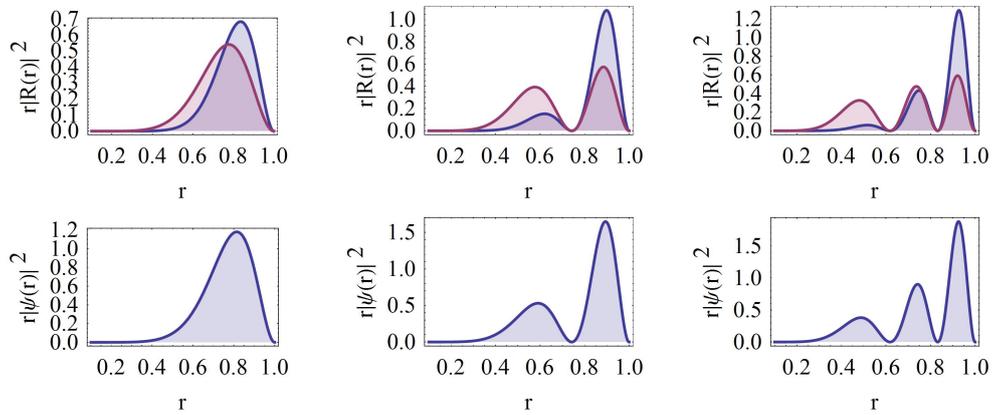


Figura 4.3: Autofunções para $m = 2$. As curvas azul e rosa se referem às componentes superior e inferior, respectivamente, para o caso Rashba. As autofunções de Dresselhaus são invertidas: azul para componente inferior, e rosa para superior.

das densidades de probabilidade radiais dos três primeiros estados com $m = 2$. Os autovalores de energia são 36, 137; 153, 26 e 351, 53, para os estados fundamental, primeiro e segundo excitados respectivamente. $R(r)$ representa $f(r)$ e $g(r)$. As curvas azuis se referem a $r|a_k f(r)|^2$ e as curvas rosas às funções $r|a_k g(r)|^2$, onde $f(r)$ e $g(r)$ são as funções de onda radiais das componentes inferior e superior, respectivamente. Nos quadros inferiores estão plotados os gráficos das densidades de probabilidade radiais completas $r|\psi(r)|^2$, onde $|\psi(r)|^2 = |a_k|^2(|f(r)|^2 + |g(r)|^2)$. Utilizando unidades de Rydberg atômicas e $r_i = 0.1$, $r_e = 1.0$, $\alpha_R = 0,125$, $\mu_1 = 1$. Os valores esperados da posição são $\langle r \rangle_f = 0,800; 0,840; 0,852$, e $\langle r \rangle_g = 0,738; 0,700; 0,682$.

4.3 Hamiltoniano de Dresselhaus

Nesta última parte do trabalho, vamos fazer as mesmas verificações que fizemos no caso anterior, onde a partícula de massa efetiva variável estava submetida a uma interação SO do tipo Rashba, aqui faremos a investigação para o caso de uma interação SO do tipo Dresselhaus, seguindo os mesmos passos, vamos iniciar esta seção fazendo o estudo do Hamiltoniano para o sistema com massa variável, mas agora considerando o termo de Dresselhaus.

O Hamiltoniano neste caso tem a mesma estrutura do caso Rashba, este é composto por uma parte cinética e por uma parte referente à interação SO, as componentes cinéticas \mathcal{H}_0 são as mesmas do caso Rashba, logo não reproduziremos o cálculo delas aqui, isto já foi feito na seção (4.2), então faremos o tratamento somente das componentes fora da diagonal principal (\mathcal{H}_{12} e \mathcal{H}_{21}), comecemos com,

$$\mathcal{H}_{12} = \alpha_D(P_x + iP_y), \quad (4.143)$$

usando o mesmo operador momento definido para sistemas com massa variável,

e considerando duas dimensões,

$$\mathcal{H}_{12} = -\alpha_D i \left(\mathcal{M} \partial_x + \frac{1}{2} \partial_x \mathcal{M} \right) + \alpha_D \left(\mathcal{M} \partial_y + \frac{1}{2} \partial_y \mathcal{M} \right). \quad (4.144)$$

Usando a transformação (3.9) e depois de algumas simplificações,

$$\mathcal{H}_{12} = -\frac{i\alpha_D e^{i\theta}}{\sqrt{\mu}} \left(\partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta - \frac{1}{4\mu} \frac{d\mu}{dr} \right). \quad (4.145)$$

A componente \mathcal{H}_{21} ,

$$\mathcal{H}_{21} = \alpha_D (P_x - iP_y), \quad (4.146)$$

pode ser calculada de forma análoga aplicando-se a transformação (3.9)

$$\mathcal{H}_{21} = \frac{-i\alpha_D e^{-i\theta}}{\sqrt{\mu}} \left(\partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta - \frac{1}{4\mu} \frac{d\mu}{dr} \right). \quad (4.147)$$

Assim obtemos as nossas quatro componentes do Hamiltoniano de Dresselhaus para massa efetiva dependente da posição. Na próxima subseção, trataremos da conservação da componente J_z do momento angular total J para este acoplamento.

4.3.1 Conservação do Momento Angular

Nesta subseção verificaremos a conservação da componente J_z do operador momento angular J para partículas de spin 1/2 com massa efetiva dependente da coordenada radial r , submetidos a uma interação spin-órbita do tipo Dresselhaus, muitos dos cálculos necessários aqui já foram reproduzidos na subseção (4.2.1), onde tratamos o caso Rashba. A relação de comutação entre a componente cinética \mathcal{H}_0 do Hamiltoniano total \mathcal{H} , e a componente J_z , que foi tratada anteriormente é a mesma para o presente caso, desta forma, não repetiremos este cálculo aqui. Partimos da componente do Hamiltoniano total \mathcal{H} , responsável pela interação SO, já em coordenadas polares, cuja forma é,

$$\mathcal{H}_{so}^D = 2\alpha_D \left(\frac{\mathcal{M}}{r} S_\theta L_z + \mathcal{M} S_r P_r + \frac{1}{2} S_r (P_r \mathcal{M}) \right) \quad (4.148)$$

O comutador entre esta componente e J_z pode ser escrito como,

$$[\mathcal{H}_{so}^D, J_z] = [\mathcal{H}_{so}^D, L_z] + [\mathcal{H}_{so}^D, S_z] \quad (4.149)$$

Tratando primeiro a parcela em L_z , temos,

$$[\mathcal{H}_{so}^D, L_z] = 2\alpha_D \left[\frac{\mathcal{M}}{r} S_\theta L_z + \mathcal{M} S_r P_r + \frac{1}{2} S_r (P_r \mathcal{M}), L_z \right] \quad (4.150)$$

Usando novamente propriedades dos comutadores, podemos escrever,

$$[\mathcal{H}_{so}^D, L_z] = 2\alpha_D \left(\left[\frac{\mathcal{M}}{r} S_\theta L_z, L_z \right] + [\mathcal{M} S_r P_r, L_z] + \left[\frac{1}{2} S_r (P_r \mathcal{M}), L_z \right] \right). \quad (4.151)$$

Vamos calcular cada parcela acima, aqui já utilizaremos de antemão as relações (3.31), logo para a primeira,

$$\left[\frac{\mathcal{M}}{r} S_\theta L_z, L_z \right] = \frac{\mathcal{M}}{r} [S_\theta, L_z] L_z, \quad (4.152)$$

considerando a segunda parcela,

$$[\mathcal{M} S_r P_r, L_z] = \mathcal{M} [S_r, L_z] P_r \quad (4.153)$$

e finalmente a terceira parcela,

$$\left[\frac{1}{2} S_r (P_r \mathcal{M}), L_z \right] = \frac{1}{2} [S_r, L_z] (P_r \mathcal{M}). \quad (4.154)$$

Analisemos o termo $[\mathcal{H}_{so}^D, S_z]$,

$$[\mathcal{H}_{so}^D, S_z] = 2\alpha_D \left[\frac{\mathcal{M}}{r} S_\theta L_z + \mathcal{M} S_r P_r - \frac{1}{2} S_r (P_r \mathcal{M}), S_z \right]. \quad (4.155)$$

Separando as componentes do comutador acima temos,

$$[\mathcal{H}_{so}^D, S_z] = 2\alpha_D \left(\left[\frac{\mathcal{M}}{r} S_\theta L_z, S_z \right] + [\mathcal{M} S_r P_r, S_z] + \left[\frac{1}{2} S_r (P_r \mathcal{M}), S_z \right] \right), \quad (4.156)$$

calculando separadamente as parcelas, e também usando as relações (3.31), temos para a primeira,

$$\left[\frac{\mathcal{M}}{r} S_\theta L_z, S_z \right] = \frac{\mathcal{M}}{r} [S_\theta, S_z] L_z, \quad (4.157)$$

para a segunda parcela,

$$[\mathcal{M} S_r P_r, S_z] = \mathcal{M} [S_r, S_z] P_r, \quad (4.158)$$

e finalmente a terceira parcela,

$$\frac{1}{2} [S_r (P_r \mathcal{M}), S_z] = \frac{1}{2} [S_r, S_z] (P_r \mathcal{M}). \quad (4.159)$$

Reunindo todas as contribuições obtemos,

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_{so}^D, J_z] &= 2\alpha_D \left(\frac{\mathcal{M}}{r} [S_\theta, L_z] L_z + \mathcal{M} [S_r, L_z] P_r + \frac{1}{2} [S_r, L_z] (P_r \mathcal{M}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mathcal{M}}{r} [S_\theta, S_z] L_z + \mathcal{M} [S_r, S_z] P_r + \frac{1}{2} [S_r, S_z] (P_r \mathcal{M}) \right), \end{aligned} \quad (4.160)$$

a expressão acima se anula se usarmos as relações canônicas fundamentais do momento angular e as relações definidas em (3.48). Assim substituindo,

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_{so}^D, J_z] &= 2\alpha_D \left(\frac{\mathcal{M}}{r} (-iS_r) L_z + \mathcal{M} (iS_\theta) P_r + \frac{1}{2} (iS_\theta) (P_r \mathcal{M}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mathcal{M}}{r} (iS_r) L_z + \mathcal{M} (-iS_\theta) P_r + \frac{1}{2} (-iS_\theta) (P_r \mathcal{M}) \right), \end{aligned} \quad (4.161)$$

onde depois de diversos cancelamentos, como foi feito no caso Rashba, temos o resultado procurado,

$$[\mathcal{H}_{so}^D, J_z] = 0, \quad (4.162)$$

que representa a conservação da componente J_z do momento angular total para partículas de spin 1/2 com massa dependente da coordenada radial r , mas agora submetidos a uma interação spin-órbita do tipo Dresselhaus.

4.3.2 Sistema de Equações Acopladas

Nesta subseção vamos buscar um sistema de equações, da mesma forma que foi feita para o caso Rashba, assim, começamos estabelecendo um problema de autovalor,

$$H\psi(r, \theta) = E\psi(r, \theta), \quad (4.163)$$

onde mais uma vez a função de onda $\psi(r, \theta)$ é um bi-espinor (3.51). Propomos um ansatz para este bi-espinor semelhante ao do caso Rashba,

$$\psi(r, \theta) = \begin{pmatrix} b_k g(r) e^{i(m+\frac{1}{2})\theta} \\ a_k f(r) e^{i(m-\frac{1}{2})\theta} \end{pmatrix} \quad (4.164)$$

A equação de autovalor pode ser colocada em uma forma mais explícita como na equação (3.52). Desta igualdade retiramos a seguinte expressão, de onde obteremos a nossa primeira equação do sistema,

$$\mathcal{H}_{11} b_k g(r) e^{i(m+\frac{1}{2})\theta} + \mathcal{H}_{12} a_k f(r) e^{i(m-\frac{1}{2})\theta} = E b_k g(r) e^{i(m+\frac{1}{2})\theta}, \quad (4.165)$$

substituindo as componentes \mathcal{H}_{11} e \mathcal{H}_{12} nesta expressão,

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{\mu} \partial_r^2 - \frac{(1-n)}{\mu r} \partial_r - \frac{1}{\mu r^2} \partial_\theta^2 - \frac{3n^2/16}{\mu r^2} \right) b_k g(r) \\ & e^{i(m+\frac{1}{2})\theta} - i \frac{\alpha_D e^{i\theta}}{\sqrt{\mu}} \left(\partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta - \frac{1}{4\mu} \frac{d\mu}{dr} \right) a_k f(r) e^{i(m-\frac{1}{2})\theta} = \\ & = E b_k g(r) e^{i(m+\frac{1}{2})\theta}, \end{aligned} \quad (4.166)$$

tomando o caso especial de $n = 2$ e simplificando, escrevemos a primeira equação do sistema,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{2} - m^2 - m \right] + \mu E \right) g(r) = \frac{i\alpha_D a_k \sqrt{\mu}}{b_k} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{m}{r} \right) f(r). \quad (4.167)$$

Para encontrar a segunda equação do sistema, partimos da expressão abaixo, semelhante ao caso anterior,

$$\mathcal{H}_{21} b_k g(r) e^{i(m+\frac{1}{2})\theta} + \mathcal{H}_{22} a_k f(r) e^{i(m-\frac{1}{2})\theta} = E a_k f(r) e^{i(m-\frac{1}{2})\theta}, \quad (4.168)$$

substituindo as componentes \mathcal{H}_{21} e \mathcal{H}_{22} ,

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{\mu} \partial_r^2 - \frac{(1-n)}{\mu r} \partial_r - \frac{1}{\mu r^2} \partial_\theta^2 - \frac{3n^2/16}{\mu r^2} \right) a_k f(r) \\ & e^{i(m-\frac{1}{2})\theta} - \frac{\alpha_D i e^{-i\theta}}{\sqrt{\mu}} \left(\partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta - \frac{1}{4\mu} \frac{d\mu}{dr} \right) b_k g(r) e^{i(m+\frac{1}{2})\theta} = \\ & = E a_k f(r) e^{i(m-\frac{1}{2})\theta} \end{aligned} \quad (4.169)$$

e fazendo $n = 2$ finalmente temos a segunda equação do sistema,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{2} - m^2 + m \right] + \mu E \right) f(r) = -\frac{i\alpha_D b_k \sqrt{\mu}}{a_k} \left(\frac{d}{dr} + \frac{m}{r} \right) g(r) \quad (4.170)$$

Agora que encontramos o nosso sistema de equações, para o Hamiltoniano com interação SO escrita via termo de Dresselhaus, partiremos para a próxima subseção, onde tentaremos encontrar a solução para este sistema.

4.3.3 Autofunções

Começaremos pela primeira equação do sistema, então, reescrevendo,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{2} - m^2 - m \right] + \mu E \right) g(r) = \frac{\alpha_D i a_k \sqrt{\mu}}{b_k} \left(-\frac{d}{dr} + \frac{m}{r} \right) f(r) \quad (4.171)$$

Fazendo a mesma substituição de variável utilizada no caso Rashba, $z = \gamma r^2$ obtemos,

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{(1/2 - m^2)}{4z^2} + \frac{\mu_1 E}{4\gamma^2} \right) g(z) - \frac{m}{4z^2} g(z) = \frac{\alpha_D i a_k \sqrt{\mu_1}}{4\gamma b_k} \left(-2 \frac{d}{dz} + \frac{m}{z} \right) f(z) \quad (4.172)$$

Usando a segunda equação,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{2} - m^2 + m \right] + \mu E \right) f(r) = -\frac{\alpha_D i b_k \sqrt{\mu}}{a_k} \left(\frac{d}{dr} + \frac{m}{r} \right) g(r) \quad (4.173)$$

Fazendo a mesma substituição de variável, temos,

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{(1/2 - m^2)}{4z^2} + \frac{\mu_1 E}{4\gamma^2}\right) f(z) + \frac{m}{4z^2} f(z) = -\frac{\alpha_D i b_k \sqrt{\mu_1}}{4\gamma a_k} \left(2\frac{d}{dz} + \frac{m}{z}\right) g(z) \quad (4.174)$$

Adicionando as equações (4.172) e (4.174), temos,

$$\begin{aligned} &\left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{(1/2 - m^2)}{4z^2} + \frac{\mu_1 E}{4\gamma^2}\right) F(z) + \frac{m}{4z^2} G(z) = \\ &= \frac{-\alpha_D i \sqrt{\mu_1}}{4\gamma} \left[\left(\frac{a_k}{b_k} - \frac{b_k}{a_k}\right) G'(z) + \left(\frac{a_k}{b_k} + \frac{b_k}{a_k}\right) F'(z) - \right. \\ &\left. - \frac{m}{2z} \left[\left(\frac{a_k}{b_k} + \frac{b_k}{a_k}\right) G(z) + \left(\frac{a_k}{b_k} - \frac{b_k}{a_k}\right) F(z) \right] \right] \end{aligned} \quad (4.175)$$

E subtraindo estas mesmas equações, temos,

$$\begin{aligned} &\left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{(1/2 - m^2)}{4z^2} + \frac{\mu_1 E}{4\gamma^2}\right) G(z) + \frac{m}{4z^2} F(z) = \\ &\frac{\alpha_D i \sqrt{\mu_1}}{4\gamma} \left[\left(\frac{a_k}{b_k} - \frac{b_k}{a_k}\right) F'(z) + \left(\frac{a_k}{b_k} + \frac{b_k}{a_k}\right) G'(z) \right. \\ &\left. - \frac{m}{2z} \left[\left(\frac{a_k}{b_k} + \frac{b_k}{a_k}\right) F(z) + \left(\frac{a_k}{b_k} - \frac{b_k}{a_k}\right) G(z) \right] \right] \end{aligned} \quad (4.176)$$

Impondo que $a_k = b_k$, as equações acima ficam,

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \frac{d}{dz} + \frac{1}{4} \left[\frac{1/2 - m^2}{z^2} - \frac{4E}{\alpha_D^2} \right]\right) F(z) = \frac{m}{2z} \left(1 - \frac{1}{2z}\right) G(z), \quad (4.177)$$

e

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \frac{d}{dz} + \frac{1}{4} \left[\frac{1/2 - m^2}{z^2} - \frac{4E}{\alpha_D^2} \right]\right) G(z) = -\frac{m}{2z} \left(1 + \frac{1}{2z}\right) F(z). \quad (4.178)$$

Agora vamos usar uma última transformação,

$$F(z) = e^{-z/2} \sqrt{z} A(z) \quad (4.179)$$

$$G(z) = e^{z/2} \sqrt{z} B(z) \quad (4.180)$$

usando as derivadas F', F'', G', G'' no último sistema, obtemos,

$$\left[\frac{d^2}{dz} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} - \frac{1}{4} \left(1 + \frac{4E}{\alpha_D^2} + \frac{1/2 + m^2}{z^2}\right) \right] A(z) = \frac{me^z}{2z} \left(1 - \frac{1}{2z}\right) B(z) \quad (4.181)$$

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} - \frac{1}{4} \left(1 + \frac{4E}{\alpha_D^2} + \frac{1/2 + m^2}{z^2} \right) \right] B(z) = -\frac{me^{-z}}{2z} \left(1 + \frac{1}{2z} \right) A(z). \quad (4.182)$$

Utilizando então a mesma notação proveniente das funções de Bessel (4.89) e (4.90), vistas no capítulo anterior (tomando o cuidado de trocar a constante α_R pela constante α_D) temos nosso último sistema modificado,

$$\begin{cases} \nabla_\nu A(z) = \frac{me^z}{2z} \left(1 - \frac{1}{2z} \right) B(z) \\ \nabla_\nu B(z) = -\frac{me^{-z}}{2z} \left(1 + \frac{1}{2z} \right) A(z) \end{cases}, \quad (4.183)$$

observe que este sistema é muito parecido com o caso Rashba, podemos perceber que aqui os termos do lado direito do sistema estão trocados, em relação ao caso do sistema Rashba.

Aqui, partimos para a solução do sistema acima, vamos tentar nos guiar pelos mesmos métodos utilizados no caso Rashba, então, vamos primeiro apresentar a solução do sistema para $m = 0$, depois trabalharemos o sistema para o caso onde $m \neq 0$.

Caso para $m = 0$:

Neste caso temos o seguinte sistema à disposição,

$$\begin{cases} \nabla_\nu A(z) = 0 \\ \nabla_\nu B(z) = 0 \end{cases},$$

O respectivo sistema se desacopla e se transforma em duas equações de Bessel homogêneas, de primeira espécie, de ordem $\nu_0 = \frac{1}{\sqrt{8}}$, As soluções neste caso são escritas como,

$$A_0(z) = c_1 J_{\nu_0}(kz) + c_2 J_{-\nu_0}(kz) \quad (4.184)$$

e

$$B_0(z) = d_1 J_{\nu_0}(kz) + d_2 J_{-\nu_0}(kz) \quad (4.185)$$

Agora que já conhecemos as funções $A_0(z)$ e $B_0(z)$, podemos retornar para as autofunções radiais $f(z)$ e $g(z)$, para o caso $m = 0$. O cálculo é simples e as autofunções radiais são (tem uma troca no sinal das exponenciais, em relação ao caso Rashba),

$$f_0(z) = \frac{\sqrt{z}}{2} [(c_1 e^{-z/2} + d_1 e^{z/2}) J_{\nu_0}(kz) + (c_2 e^{-z/2} + d_2 e^{z/2}) J_{-\nu_0}(kz)] \quad (4.186)$$

e

$$g_0(z) = \frac{\sqrt{z}}{2} [(c_1 e^{-z/2} - d_1 e^{z/2}) J_{\nu_0}(kz) + (c_2 e^{-z/2} - d_2 e^{z/2}) J_{-\nu_0}(kz)], \quad (4.187)$$

onde $\nu_0 = \frac{1}{\sqrt{8}}$ e c_1, c_2, d_1 e d_2 são constantes arbitrárias.

Caso $m \neq 0$

Para este caso, faremos o mesmo procedimento do caso anterior, primeiro apresentaremos as soluções do sistema homogêneo, que são,

$$A_m^h(z) = c_{1m} J_{\nu_m}(kz) + c_{2m} J_{-\nu_m}(kz), \quad (4.188)$$

e

$$B_m^h(z) = d_{1m} J_{\nu_m}(kz) + d_{2m} J_{-\nu_m}(kz). \quad (4.189)$$

Com estes resultados, podemos encontrar a parte homogênea das funções radiais, que são,

$$f_m^h(z) = \frac{\sqrt{z}}{2} [(c_{1m} e^{z/2} + d_{1m} e^{-z/2}) J_{\nu_m}(kz) + (c_{2m} e^{z/2} + d_{2m} e^{-z/2}) J_{-\nu_m}(kz)] \quad (4.190)$$

e

$$g_m^h(z) = \frac{\sqrt{z}}{2} [(c_{1m} e^{z/2} - d_{1m} e^{-z/2}) J_{\nu_m}(kz) + (c_{2m} e^{z/2} - d_{2m} e^{-z/2}) J_{-\nu_m}(kz)] \quad (4.191)$$

Para as soluções particulares, temos que considerar o sistema não homogêneo, aqui encontramos o mesmo problema do caso Rashba, não conhecemos uma maneira simples de resolver um sistema de equações de Bessel não homogêneas e com uma função transcendental envolvida, assim, vamos desenvolver a parte exponencial em série de Taylor e separar os termos, então,

$$\nabla_\nu A(z) = -\frac{mB(z)}{4z^2} + \frac{mB(z)}{4z} + \frac{3mB(z)}{8} + \frac{5zmB(z)}{24} - \dots, \quad (4.192)$$

onde podemos chamar, por conveniência,

$$P_{-2}(z) = -\frac{1}{4z^2}, \quad P_{-1}(z) = \frac{1}{4z}, \quad P_0(z) = \frac{3}{8}. \quad (4.193)$$

Expandindo a segunda equação do sistema (4.183) em série, temos,

$$\nabla_\nu B(z) = -\frac{mA(z)}{4z^2} - \frac{mA(z)}{4z} + \frac{3mA(z)}{8} - \frac{5zmA(z)}{24} + \dots, \quad (4.194)$$

onde definimos também,

$$P'_{-2}(z) = -\frac{1}{4z^2}, \quad P'_{-1}(z) = -\frac{1}{4z}, \quad P'_0(z) = \frac{3}{8}, \quad (4.195)$$

usando estas últimas definições no sistema (4.183), podemos colocá-lo em uma forma mais compacta,

$$\begin{cases} \nabla_\nu A(z) = (-1)^i m P'_i(z) B(z), \\ \nabla_\nu B(z) = m P'_i(z) A(z). \end{cases}.$$

Vamos resolver o sistema acima para cada termo da expansão, vamos começar pelo termo $P_0(z)$, substituindo este no sistema acima, temos,

$$\begin{cases} \nabla_\nu A(z) = \frac{3}{8} m B(z), \\ \nabla_\nu B(z) = \frac{3}{8} m A(z). \end{cases}.$$

que é o mesmo para o caso Rashba, de modo que escrevemos diretamente,

$$A_{P_0}(z) = c_I J_{\nu_m}(k'_- z) + c_{II} J_{\nu_m}(k'_+ z), \quad (4.196)$$

$$B_{P_0}(z) = c_{III} J_{\nu_m}(k'_- z) - c_{IV} J_{\nu_m}(k'_+ z). \quad (4.197)$$

Solução para $P_{-1}(z)$

$$\begin{cases} \nabla_\nu A(z) = \frac{m}{4z} B(z), \\ \nabla_\nu B(z) = -\frac{m}{4z} A(z). \end{cases},$$

multiplicando a segunda equação por i e somando as duas, temos,

$$\nabla_\nu[A(z) + iB(z)] = -\frac{im}{4z}[A(z) + iB(z)], \quad (4.198)$$

e subtraindo-as,

$$\nabla_\nu[A(z) - iB(z)] = \frac{im}{4z}[A(z) - iB(z)]. \quad (4.199)$$

Fazendo,

$$\left[\nabla_\nu + \frac{im}{4z} \right] [A(z) + iB(z)] = 0, \quad (4.200)$$

e

$$\left[\nabla_\nu - \frac{mi}{4z} \right] [A(z) - iB(z)] = 0, \quad (4.201)$$

desenvolvendo a primeira equação acima e chamando $X(z) = A(z) + iB(z)$, temos,

$$z^2 X''(z) + zX'(z) + \left(z^2 k^2 + z \frac{im}{4} - \nu_m^2 \right) X(z) = 0, \quad (4.202)$$

cuja solução é análoga à do sistema com SO do tipo Rashba, mas aqui as componentes estão alternadas,

$$X(z) = e^{-ikz} z^\nu \left\{ c'_1 U(q', 1 + 2\nu; 2ikz) + c'_2 L_{-q'}^{2\nu}(2ikz) \right\}, \quad (4.203)$$

onde q' é dado pela expressão logo abaixo da equação (4.123).

Da mesma forma, desenvolvendo a segunda equação, e definindo $Y(z) = A(z) - iB(z)$ temos,

$$z^2 Y''(z) + zY'(z) + \left(z^2 k^2 - z \frac{im}{4} - \nu_m^2 \right) Y(z) = 0 \quad (4.204)$$

que é a mesma equação (4.121) obtida na seção que estudamos o caso Rashba, assim escrevemos imediatamente a solução,

$$Y(z) = e^{-ikz} z^\nu \{d'_1 U(q, 1 + 2\nu; 2ikz) + d'_2 L_{-q}^{2\nu}(2ikz)\}, \quad (4.205)$$

onde o parâmetro q está definido logo abaixo da equação (4.121).

Assim, da mesma forma que fizemos para o caso Rashba, considerando que descartamos a solução hipergeométrica, as soluções $A(z)$ e $B(z)$ são,

$$A_{P_{-1}}(z) = \frac{1}{2} e^{-ikz} z^\nu [c'_2 L_{-q'}^{2\nu}(2ikz) + d'_2 L_{-q}^{2\nu}(2ikz)] \quad (4.206)$$

e

$$B_{P_{-1}}(z) = \frac{-i}{2} e^{-ikz} z^\nu [c'_2 L_{-q'}^{2\nu}(2ikz) - d'_2 L_{-q}^{2\nu}(2ikz)]. \quad (4.207)$$

Solução para $P_{-2}(z)$

O sistema para $P_{-2}(z)$ é,

$$\begin{cases} \nabla_\nu A(z) = -\frac{m}{4z^2} B(z), \\ \nabla_\nu B(z) = -\frac{m}{4z^2} A(z). \end{cases},$$

podemos reconhecer que é o mesmo sistema que obtivemos no caso Rashba, para esse termo. Assim, não faremos o desenvolvimento dos cálculos aqui, apresentaremos as soluções que são,

$$A_{P_{-2}}(z) = a_0 J_{\gamma_0}(kz) \quad (4.208)$$

$$B_{P_{-2}}(z) = b_0 J_{\gamma_0}(kz). \quad (4.209)$$

Desta forma, reunindo os resultados anteriores, temos uma solução particular aproximada do sistema (4.183), que pode ser escrita com a adição das soluções para os três termos (linearidade),

$$A_m^p(z) \approx A_{P_0}(z) + A_{P_{-1}}(z) + A_{P_{-2}}(z) \quad (4.210)$$

$$B_m^p(z) \approx B_{P_0}(z) + B_{P_{-1}}(z) + B_{P_{-2}}(z), \quad (4.211)$$

ou de uma forma mais explícita,

$$A_m^p(z) \approx J_{\nu_m}(k'_- z) + e^{-ikz} z^\nu [L_{-q'}^{2\nu}(2ikz) + L_{-q}^{2\nu}(2ikz)] + J_{\gamma_0}(kz), \quad (4.212)$$

e

$$B_m^p(z) \approx J_{\nu_m}(k'_+ z) + e^{-ikz} z^\nu [L_{-q'}^{2\nu}(2ikz) - L_{-q}^{2\nu}(2ikz)] + J_{\gamma_0}(kz). \quad (4.213)$$

Agora, finalmente podemos determinar as nossas autofunções radiais, lembrando,

$$f_m(z) = f_m^h(z) + f_m^p(z) \quad (4.214)$$

$$g_m(z) = g_m^h(z) + g_m^p(z) \quad (4.215)$$

ou substituindo a parte correspondente à solução particular (a parte homogênea já foi encontrada), temos a nossa forma final para as autofunções,

$$f_m(z) = f_m^h(z) + \sqrt{z} e^{-z/2} A_m^p(z) \quad (4.216)$$

$$g_m(z) = g_m^h(z) + \sqrt{z} e^{z/2} B_m^p(z) \quad (4.217)$$

Finalmente, usando as componentes radiais acima, podemos escrever o nosso espinor solução da equação de autovalor (4.163), assim como fizemos para o caso Rashba,

$$\psi(z, \theta) = a_k \begin{pmatrix} g_m(z) e^{i(m+\frac{1}{2})\theta} \\ f_m(z) e^{i(m-\frac{1}{2})\theta} \end{pmatrix}. \quad (4.218)$$

Aqui podemos fazer as mesmas considerações que fizemos quando tratamos o caso Rashba acerca dos termos extras z , z^2 etc... não os utilizamos justamente pelo pequeno valor da constante α_D , que deixaria estes termos desprezíveis. A nossa aproximação já é suficiente para o modelo proposto.

As autofunções para o sistema com SO modelada pelo termo de Dresselhaus estão plotadas nas figuras (4.1), (4.2) e (4.3). Enquanto que a componente superior para o sistema com termo de Rashba é a azul, para o de Dresselhaus ela é a rosa e vice-versa.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Futuras

Apresentei nesta dissertação um estudo detalhado sobre sistemas quânticos (partículas) de spin $1/2$, com massa efetiva constante m^* e massa efetiva dependente da posição radial $\mu(r)$, em ambos os casos trabalhei em um cenário bidimensional e uma interação spin-órbita particular estava presente. Comecei com uma introdução ao assunto e no capítulo 2 apresentei o problema do ordenamento, os Hamiltonianos propostos, com uma atenção especial ao proposto por von Roos [20], e introduzi o importante critério de Dutra e Almeida. No capítulo 3 trabalhei sistemas quânticos com uma massa efetiva constante e submetidos a uma interação spin-órbita do tipo Rashba e em seguida, no mesmo capítulo, fiz o mesmo tratamento considerando uma interação spin-órbita do tipo Dresselhaus. Construí os Hamiltonianos, provei a conservação da componente J_z do momento angular total J , construí e resolvi o sistema de equações acopladas envolvendo a parte radial, utilizando resultados da teoria das funções de Bessel e obtive as autofunções para os dois casos considerados. No capítulo 4 iniciei o estudo sistemático

dos sistemas quânticos de spin $1/2$ com massa efetiva dependente da posição radial $\mu(r)$ e submetidos a uma interação spin-órbita, também em um caso bidimensional, este capítulo é o mais importante do trabalho e o estudo desenvolvido ali é o objetivo desta dissertação, apliquei então o mesmo roteiro que foi aplicado no capítulo 3, onde considerei a massa efetiva constante, primeiro considerando estes sistemas submetidos a uma interação spin-órbita do tipo Rashba, construiu-se o Hamiltoniano, verificou-se a conservação da componente J_z do momento angular total J , construí um sistema de equações acopladas envolvendo somente a parte radial e por meio de aproximações sucessivas e transformações pude encontrar as suas soluções, obtive então as densidades radiais de probabilidade para três valores de número quântico m e alguns autovalores de energia, em seguida, na segunda parte do capítulo, fiz a mesma coisa, só que considerando o termo de Dresselhaus, encontrei então um sistema de equações para este caso e suas autofunções, vimos que as soluções oriundas do caso Rashba guardam uma certa semelhança com as do caso Dresselhaus, determinei então as densidades radiais de probabilidade também considerando três valores de m e alguns autovalores de energia. Assim, apresentei esses resultados na forma de gráficos. O presente trabalho se desenvolveu mais dentro do aspecto quantitativo do problema.

5.1 Perspectivas Futuras

Como trabalho futuro pretendo extender o domínio de investigação desses sistemas quânticos com spin $1/2$ para massas dependentes da posição radial $\mu(r)$ descritas por funções polinomiais de grau n , inteiro, mais arbitrário, não necessariamente igual a 2, como fiz aqui, onde fixei o valor 2 na função massa $\mu(r) = \mu_1 r^n$ para poder investigar como o sistema se comportava,

sendo submetido a uma interação spin-órbita particular, sem complicar demasiadamente o problema. Acredito que um grau n arbitrário e aberto nos levará a um problema mais intrincado do que o anterior, desenvolvido nesta dissertação. Este trabalho contudo já teve um pontapé inicial. Pretendo também trabalhar com esses sistemas, submetidos simultaneamente aos termos de Rashba e de Dresselhaus, e considerar a interação com um campo eletromagnético externo dependente do tempo e verificar a dinâmica envolvida nesta interação, bem como tratar a evolução temporal destes sistemas e testar o modelo de Rashba para outras bandas de energia.

Apêndice A

Cálculo de H_{so} para massa constante em coordenadas polares

Neste apêndice faremos a transformação de coordenadas das componentes fora da diagonal principal do Hamiltoniano para uma partícula com massa efetiva m^* constante, submetida a uma interação spin-órbita via termo de Rashba e depois faremos com o termo de Dresselhaus, começando com o caso Rashba, temos,

$$H_{so} = \alpha_R(P_x\sigma_y - P_y\sigma_x), \quad (\text{A.1})$$

que é a componente em coordenadas cartesianas, podemos reescrever esta expressão colocando em destaque os operadores de spin,

$$H_{so} = 2\alpha_R(P_xS_y - P_yS_x), \quad (\text{A.2})$$

usando as transformações (3.9), só que em função dos operadores P_r e L_z , temos,

$$H_{so} = 2\alpha_R \left(\left[\cos\theta P_r - \frac{1}{r} \sin\theta L_z \right] S_y - \left[\sin\theta P_r + \frac{1}{r} \cos\theta L_z \right] S_x \right), \quad (\text{A.3})$$

reagrupando os termos, temos,

$$H_{so} = 2\alpha_R \left(-\frac{1}{r} [\cos \theta S_x + \sin \theta S_y] L_z + [\cos \theta S_y - \sin \theta S_x] P_r \right). \quad (\text{A.4})$$

Agora tratando o vetor de spin \vec{S} em duas dimensões, isto é,

$$\vec{S} = S_x \hat{i} + S_y \hat{j}, \quad (\text{A.5})$$

onde (\hat{i}, \hat{j}) é a base canônica em coordenadas cartesianas, fazendo uma mudança na base para coordenadas polares, temos,

$$S = (S_x \cos \theta + S_y \sin \theta) \hat{\rho} + \frac{1}{r} (S_y \cos \theta - S_x \sin \theta) \hat{\theta}, \quad (\text{A.6})$$

podemos definir,

$$S_r = S_x \cos \theta + S_y \sin \theta \quad (\text{A.7})$$

$$S_\theta = S_y \cos \theta - S_x \sin \theta.$$

Lembrando que devemos dividir o módulo do vetor de base $\hat{\theta}$ por r para termos uma expressão dimensionalmente correta. Assim podemos usar as relações (A.7) em (A.4), chegando ao resultado procurado,

$$H_{so} = -2\alpha_R \left(\frac{1}{r} S_r L_z - S_\theta P_r \right), \quad (\text{A.8})$$

agora tratando a componente fora da diagonal principal, usando o termo de Dresselhaus, começamos da expressão em coordenadas cartesianas,

$$H_{so} = \alpha_D (P_x \sigma_x - P_y \sigma_y), \quad (\text{A.9})$$

reescrevendo esta componente em função dos operadores de spin,

$$H_{so} = 2\alpha_D (P_x S_x - P_y S_y), \quad (\text{A.10})$$

e utilizando a transformação (3.9), mas em função dos operadores P_r e L_z , temos,

$$H_{so} = 2\alpha_D \left(\left[\cos \theta P_r - \frac{1}{r} \sin \theta L_z \right] S_x - \left[\sin \theta P_r + \frac{1}{r} \cos \theta L_z \right] S_y \right). \quad (\text{A.11})$$

Reagrupando os termos,

$$H_{so} = 2\alpha_D \left([\cos \theta S_x - \sin \theta S_y] P_r - \frac{1}{r} [\cos \theta S_y + \sin \theta S_x] L_z \right), \quad (\text{A.12})$$

e utilizando o vetor de spin,

$$\vec{S} = S_x \hat{i} - S_y \hat{j} \quad (\text{A.13})$$

fazemos uma transformação de coordenadas para polares $(\hat{\rho}, \hat{\theta})$ na expressão acima para escrever,

$$S = (S_x \cos \theta - S_y \sin \theta) \hat{\rho} - \frac{1}{r} (S_y \cos \theta + S_x \sin \theta) \hat{\theta}. \quad (\text{A.14})$$

Assim, da mesma forma que foi feito para o caso anterior, podemos definir,

$$S_r = S_x \cos \theta - S_y \sin \theta \quad (\text{A.15})$$

$$S_\theta = -(S_y \cos \theta + S_x \sin \theta),$$

e finalmente usando as definições (A.15) em (A.12), temos o resultado,

$$H_{so} = 2\alpha_D \left(S_r P_r + \frac{1}{r} S_\theta L_z \right). \quad (\text{A.16})$$

Concluimos o apêndice determinando as componentes fora da diagonal principal, responsáveis pela interação SO, tanto para o caso Rashba quanto para o caso Dresselhaus, em coordenadas polares $(\hat{\rho}, \hat{\theta})$ para sistemas quânticos com massa efetiva m^* constante, em uma região bidimensional, convém comentar aqui que o cálculo para a conversão dessas coordenadas é muito semelhante para o caso das componentes \mathcal{H} fora da diagonal principal quando a massa efetiva é dependente da posição radial $\mu(r)$, caso este que foi o tema de nosso trabalho.

Apêndice B

Cálculo dos comutadores $[S_r, L_z]$ e $[S_\theta, L_z]$

Neste apêndice vamos efetuar o cálculo dos comutadores $[S_r, L_z]$ e $[S_\theta, L_z]$,

Cálculo de $[S_r, L_z]$

Para iniciar o cálculo deste comutador, vamos redefinir $L_z = P_\theta$ e também vamos reescrever o operador S_r em coordenadas cartesianas, isto é,

$$S_r = S_x \cos \theta + S_y \sin \theta, \quad (\text{B.1})$$

substituindo esta expressão, bem como a redefinição notacional P_θ no comutador $[S_r, L_z]$ e efetuando os cálculos, temos,

$$\begin{aligned} [S_x \cos \theta + S_y \sin \theta, P_\theta] &= [S_x \cos \theta, P_\theta] + [S_y \sin \theta, P_\theta] \\ &= S_x [\cos \theta, P_\theta] + S_y [\sin \theta, P_\theta], \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

utilizando propriedades operacionais dos comutadores, podemos chegar facilmente aos seguintes resultados abaixo,

$$[\cos \theta, P_\theta] = -i \sin \theta \quad [\sin \theta, P_\theta] = i \cos \theta \quad (\text{B.3})$$

assim, utilizando estes resultados, temos,

$$[S_r, L_z] = i(S_y \cos \theta - S_x \sin \theta), \quad (\text{B.4})$$

o operador S_θ pode ser colocado como uma combinação de seus equivalentes em coordenadas cartesianas,

$$S_\theta = S_y \cos \theta - S_x \sin \theta \quad (\text{B.5})$$

utilizando a expressão acima, concluímos o cálculo do nosso comutador,

$$[S_r, L_z] = iS_\theta. \quad (\text{B.6})$$

Cálculo de $[S_\theta, L_z]$

O cálculo de $[S_\theta, L_z]$ pode ser conduzido de maneira semelhante, utilizando (B.5) temos,

$$\begin{aligned} [S_y \cos \theta - S_x \sin \theta, P_\theta] &= [S_y \cos \theta, P_\theta] - [S_x \sin \theta, P_\theta] \\ &= S_y [\cos \theta, P_\theta] - S_x [\sin \theta, P_\theta], \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

utilizando novamente as relações (B.3), temos,

$$[S_\theta, L_z] = -i(S_x \cos \theta + S_y \sin \theta), \quad (\text{B.8})$$

utilizando a expressão (B.1) obtemos finalmente o resultado procurado,

$$[S_\theta, L_z] = -iS_r. \quad (\text{B.9})$$

Referências Bibliográficas

- [1] O. Mustafa, S. H. Mazharimousavi, *Int. J. Theor. Phys.* **46** (2007) 1786.
- [2] R. Koç, M. Koca, G. Şahinoğlu, *Eur. Phys. J. B* **48** (2005) 583.
- [3] E. Tsitsishvili, G. S. Lozano, A. O. Gogolin, *Phys. Rev. B* **70** (2004) 115316.
- [4] A. Çetin, *Phys. Lett. A* **372** (2008) 3852.
- [5] B.K. Pal, B. Roy, B. Basu, *Phys. Lett. A* **374** (2010) 4369.
- [6] V. V. Kudryashov, *Nonlinear Phenomena in Complex Systems* **12** (2009) 199.
- [7] A. Keshavarz, N. Zamani, *Superlattices and Microstructures*, **58** (2013) 191.
- [8] A. D. Alhaidari, *Int. J. Theor. Phys.* **42** (2003) 2999.
- [9] A. G. M. Schmidt, *Phys. Lett. A* **353** (2006) 459.
- [10] A. G. M. Schmidt, *J. Phys. A* **42** (2009) 245304.
- [11] A. G. M. Schmidt, A. D. Azeredo, A. Gusso, *Phys. Lett. A* **372** (2008) 2774.

- [12] A. D. Alhaidari, Phys. Lett. A **322** (2004) 72.
- [13] S.-Q. Shen, *Topological Insulators*, Springer (2012).
- [14] J. Yu, S.-H. Dong, Phys. Lett. A **325** (2004) 194.
- [15] L. Dekar, L. Chetouani, T.F. Hammann, J. Math. Phys. **39** (1998) 2551.
- [16] S. Yao, X. Zhou, G. Hu, New. J. Phys. **10** (2008) 043020.
- [17] Y. Hamdouni, J. Phys. A **44** (2011) 385301.
- [18] S. Zhang, D. A. Genov, C. Sun, X. Zhang, Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 123002.
- [19] A. S. Dutra, C. A. S. Almeida, Phys. Lett. A **275** (2000) 25
- [20] O. von Roos, Phys. Rev.B **27** (1983) 7547.
- [21] E. I. Rashba, Sov. Phys. Solid State **2** (1960) 1109.
- [22] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer (2003).
- [23] G. Bastard, Phys. Rev. **152** (1981) 5693.
- [24] T. Gora, F. Williams, Phys. Rev. **177** (1969) 1179.
- [25] D. J. BenDaniel, C. B. Duke, Phys. Rev. **152** (1966) 683
- [26] T.L. Li, K. J. Kuhn, Phys. Rev. B **47** (1993) 12760.
- [27] Q.-G. Zhu, H. Kroemer, Phys. Rev. B **27** (1983) 3519.
- [28] L. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill (1949).
- [29] P. Földi, O. Kálmán, M. G. Benedict, Phys. Rev. B **82** (2010) 165322.

- [30] E. N. Bulgakov, A. F. Sadreev, JETP Letters **73** (2001) 505.
- [31] G. N. Watson, *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*, Merchant Books (2008).
- [32] B.G.Korenev, *Bessel Functions and their applications*, Taylor & Francis (2002).
- [33] N.N.Lebedev, *Special Functions and Their Applications*, Dover (1972).