SBI-IFUSP

305M810T05761

16

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Estudo teórico da resistividade longitudinal de um poço quântico duplo com a presença do efeito Rashba

Bruno Anghinoni

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Orientador:
Prof. Dr. Gennady Gusev

Comissão examinadora:
Prof. Dr. Gennady Gusev - IFUSP
Prof. Dr. Alexandre Levine - IFUSP
Prof. Dr. Marcelo Marques - ITA

São Paulo
2012

530.41
A587e

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Anghinoni, Bruno

Estudo teórico da resistividade longitudinal de um poço quântico duplo com a presença do efeito Rashba. – São Paulo, 2012.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física – Depto. de Física de Materiais e Mecânica

Orientador: Prof. Dr. Guennady Gusev

Área de Concentração: Física de Semicondutores

Unitermos: 1. Física do Estado Sólido; 2. Propriedades dos Sólidos; 3. Física Computacional.

USP/IF/SBI-040/2012

Resumo

Neste trabalho apresentamos cálculos teóricos da resistividade longitudinal de um poço quântico quadrado duplo formado pela heteroestrutura semicondutora $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$, considerando duas sub-bandas ocupadas e o desdobramento de spin causado pelo chamado efeito Rashba, que corresponde a um desdobramento de spin devido à ausência de simetria de inversão espacial na heteroestrutura. A descrição desse efeito é dado segundo o modelo de Kane 8x8, utilizando o método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ aliado à Aproximação da Função Envelope. Determinamos numericamente as constantes de acoplamento spin-órbita provenientes do modelo adotado, através de um procedimento de cálculo autoconsistente. Deduzimos então os níveis de energia da heteroestrutura na presença simultânea de um campo magnético e do efeito Rashba, e usamos esses níveis para o cálculo da resistividade longitudinal. Além disso, analisamos criticamente uma proposta teórica de dispositivo de spin baseado no efeito Rashba existente na literatura [KOGA, T. et al. *Physical Review Letters*, v.88, n°12, 2002], elucidando um equívoco conceitual nas hipóteses assumidas.

PALAVRAS-CHAVE: spintrônica, efeito Rashba, magnetoresistência.

Abstract

In this work we present theoretical calculations of the longitudinal resistivity of a double quantum well formed by the semiconducting heterostructure $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$, considering two occupied subbands and the spin splitting caused by the so-called Rashba effect, which corresponds to a spin splitting due to the absence of spatial inversion symmetry in the heterostructure. The description of this effect is given according to the 8x8 Kane model, using the $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ method along with the Envelope Function Approximation. We determine numerically the spin-orbit coupling constants arising from the chosen model, through a self-consistent procedure. We deduce then the energy levels of the heterostructure in the simultaneous presence of a magnetic field and of the Rashba effect, and use this energy levels for the calculations of the longitudinal resistivity. Besides that, we analyze critically a theoretical proposal of a spin device based on Rashba effect existing in the literature [KOGA, T. et al.*Physical Review Letters*, v.88, n°12, 2002], elucidating a conceptual mistake on the assumed hypotheses.

KEYWORDS: spintronics, Rashba effect, magnetoresistance.

Lista de Figuras

1.1 Representação esquemática de uma heteroestrutura semicondutora típica, consistindo de um poço quântico quadrado simples formado pela junção das ligas GaAs e $Al_xGa_{1-x}As$. 2

1.2 Estrutura de bandas ilustrativa na direção de crescimento da heteroestrutura. As linhas mais finais ilustram as bandas de energia propriamente ditas (espaço recíproco, direção k_z), enquanto as linhas mais espessas ilustram as descontinuidades estruturais de energia devido à presença de diferentes materiais (espaço real, direção z). Observamos a formação de poços quânticos para as bandas de condução e de valência na região do material GaAs (figura retirada da referência [33]). 3

1.3 Representação do funcionamento do SpinFET. $N(E)$ denota a densidade de estados, E a energia e E_F a energia de Fermi. Através da aplicação sistemática da tensão de porta, podemos controlar a orientação do spin eletrônico quando esse atinge o dreno ferromagnético, e assim modular a corrente elétrica no dispositivo. O modo *off* (isto é, corrente nula) é ilustrado na figura. 6

1.4 Níveis de energia de uma camada de inversão ilustrativa na presença de um campo magnético. Com o aumento de B, os níveis de energia irão sucessivamente cruzar o nível de Fermi E_F, gerando picos na condutividade do material. Notemos que a interação de Zeeman não é levada em conta. 8

2.1 Estrutura cristalina *zincblende*. Se considerarmos a liga GaAs por exemplo, as esferas vermelhas corresponderão ao material Ga e as esferas azuis ao material As. 13

2.2 Formação ilustrativa de orbitais ligantes e anti-ligantes (figura retirada da referência [33]). Orbitais degenerados de átomos isolados ($\varphi_S(A)$ e $\varphi_S(B)$) se aproximam, dando origem a dois novos estados. Aquele com densidade eletrônica maior na região entre os átomos possui energia mais baixa, e é por isso denominado orbital ligante. Aquele com densidade eletrônica menor na região entre os átomos possui energia maior, e é denominado orbital anti-ligante. 14
2.3 Bandas de energia consideradas no modelo de Kane 8x8. . . . 16
2.4 Exemplo genérico de uma função de onda para o estado fundamental em um poço quadrado de 6 nm em uma heteroestrutura. A linha mais fina corresponde à componente na direção z da função envelope ($\varphi_0(z)$), enquanto a linha mais espessa corresponde à função de onda nessa direção ($\Psi_0(z)$). 19
2.5 Descontinuidades das bandas da heteroestrutura. O zero da energia é tomado no fundo da banda de condução. 22

3.1 (a) Representação esquemática do dispositivo proposto em [17]. (b) Perfis dos potencias das bandas de condução (figura retirada da própria referência). Vemos o alinhamento de níveis de tunelamento ressonante dependentes de spin, através do controle da tensão entre o emissor e o coletor (V_{EC}). As flechas para cima e para baixo denotam os autoestados de spin. As regiões sombreadas representam os contatos elétricos para as medidas da corrente em função da tensão aplicada. 32
3.2 Relações de dispersão quando os 2DEG são considerados não interagentes (figura retirada da referência [37]). 33
3.3 Relações de dispersão quando consideramos o poço integralmente (figura retirada da referência [37]). 34
3.4 Funções de onda para um poço duplo InSb/$Al_{0.12}In_{0.88}Sb$ de 500Å sob uma tensão de porta de 0.6 Volts. Vemos que cada função de onda se concentra fortemente em apenas um dos poços. Detalhes do método de cálculo são encontrados no capítulo 6. 35

4.1 Representação esquemática da obtenção experimental de ρ_{xx} em uma heteroestrutura genérica. Uma pequena corrente elétrica I é aplicada na região do poço quântico na direção x, e a tensão V_{xx} é então medida. Da curva corrente-tensão (I-V_{xx}) obtida, podemos extrair o valor da magnetoresistência para cada campo magnético B. Sabendo então as dimensões da amostra, obtemos a resistividade longitudinal ρ_{xx}. 45
4.2 Níveis de energia $\epsilon_{\nu N\sigma}$ e nível de Fermi E_F para um poço duplo. Toda vez que ocorrer o alinhamento de dois níveis de energia de mesma orientação de spin e índices de sub-banda diferentes, teremos uma pico na resistividade longitudinal devido às oscilações MIS. 48

5.1 Descontinuidades nas badas da estrutura para um poço quadrado duplo 51

6.1 Soluções numéricas obtidas acima e abaixo da energia real $\epsilon = 29.43$ meV para um elétron num poço simples de GaAs de largura 100 Å. 57
6.2 Exemplo de cálculo autoconsistente para um poço quadrado de $Al_{0.48}In_{0.52}As/Ga_{0.47}In_{0.53}As$ com 140Å de comprimento sob tensão de porta $V_g = 1$ V. Os potenciais de Hartree $V_d(z)$ e $V_{ee}(z)$ são mostrados, bem como o potencial total $V_T(z) = V_c(z) + V_{ee}(z) + V_d(z)$, os níveis de energia e as funções de onda envelope na direção z. 58
6.3 Representação esquemática da dopagem modulada na heteroestrutura. A largura de ambas as regiões de dopagem é assumida idêntica, com valor w (as densidades de dopagens N_a e N_b podem, no entanto, serem diferentes). A tensão de porta aplicada (V_g) também é ilustrada. 64
6.4 Densidade de estados $g^{(2D)}(E)$ (equação 6.34). As regiões sombreadas denotam os autoestados ocupados. O campo magnético B é aumentado de (a) para (c), e podemos ver que $E_F^{(2D)}$ se desloca para manter a densidade eletrônica constante. Efeitos de desdobramento de spin não são mostrados. 66

7.1 Funções de onda envelope na direção z, níveis de energia e potencial total para $V_g = 0$ V. Notemos que $\epsilon_1 - \epsilon_0 \cong 0.5$ meV, e por isso sua diferença não é visível na escala adotada para as energias. 68

7.2 Funções de onda envelope na direção z, níveis de energia e potencial total para $V_g = 0.3$ V. Vemos que as funções de onda se concentram fortemente em um dos poços, devido à assimetria no potencial total. 68
7.3 Constantes de acoplamento spin-órbita em função da tensão de porta obtidas através do cálculo autoconsistente. 69
7.4 Níveis de energia em função da tensão de porta. Vemos que possuímos apenas duas sub-bandas ocupadas sob todo o intervalo de tensões considerado. Além disso, o nível de energia ϵ_2 permanece relativamente distantes dos níveis ϵ_0 e ϵ_1. 70
7.5 Níveis de energia $\epsilon_{\nu N\sigma}$ e nível de Fermi $E_F^{(2D)}$ para $B = 1.5$ T. Vemos que a energia cresce com o número quântico L de modo quase-linear. O desdobramento de spin existente não é claramente visível na escala utilizada, devido ao pequeno valor de α_ν. Notemos que as linhas do gráfico meramente conectam os pontos, uma vez que os níveis de energia são, naturalmente, discretos. 71
7.6 Desdobramento de spin para cada sub-banda sob $B = 1.5$ T. Observamos o aumento do desdobramento em função do número quântico N. 72
7.7 Níveis de energia em função de B para os cinco primeiros autoestados ocupados das quatro bandas consideradas. O desdobramento de spin não é claro na escala adotada devido ao pequeno valor das constantes de Rashba (exceto para $N = 0$). 72
7.8 Resistividade longitudinal ρ_{xx} em função do campo magnético para $\Gamma = 1.5$ meV. Não observamos mais estruturas de batimentos, devido à presença dos desdobramentos de spin. Além disso, não observamos oscilações claras sob campos pequenos. . 73
7.9 Variação do nível de Fermi $E_F^{(2D)}$ em função do campo magnético para $\Gamma = 1.5$ meV. 74
7.10 Comparação da resistividade longitudinal calculada quando consideramos artificialmente $g^* = 0$. Vemos que a resistividade praticamente não é alterada, de modo que desdobramento de spin gerado pelo efeito Zeeman não é expressivo em nosso sistema para os campos magnéticos considerados. 75
7.11 Resistividade longitudinal $\rho_{xx}(B)$ quando consideramos artificialmente $\alpha_0 = \alpha_1 = 0$. Vemos que a resistividade é levemente alterada, e apenas sob B pequenos. 76

7.12 Resistividade longitudinal ρ_{xx} em função do campo magnético para $\Gamma = 0.4$ meV. Observamos um número maior de picos em comparação com o caso anterior. Tal fato deve ocorrer devido à presença dos desdobramentos de spin, que agora se tornam mais influentes no comportamento da resistividade devido ao menor valor de Γ utilizado. 77
7.13 Variação do nível de Fermi $E_F^{(2D)}$ em função do campo magnético para $\Gamma = 0.4$ meV. 78
7.14 Comparação da resistividade longitudinal calculada quando consideramos artificialmente $g^* = 0$. Observamos que o comportamento da resistividade muda de modo cada vez mais significativo conforme aumentamos B. Esse fato é esperado, uma vez que a energia da interação de Zeeman aumenta linearmente com B e é independente do número quântico N. 79
7.15 Resistividade longitudinal $\rho_{xx}(B)$ quando consideramos artificialmente $\alpha_0 = \alpha_1 = 0$. Vemos que a resistividade sofre alterações mais significativas sob campos magnéticos pequenos. 80
7.16 Resistividade longitudinal $\rho_{xx}(B)$ quando consideramos artificialmente $\alpha_0 = 200.0$ meV·Å e $\alpha_1 = 150.0$ meV·Å. 80
7.17 Figura (7.16) ampliada para a região de B pequeno. Observamos estruturas similares a batimentos na resistividade. 81
7.18 Valores do campo magnético B que geram os alinhamentos de níveis de energia relevantes para as oscilações MIS e Shubnikov-de Haas no caso $\Gamma = 1.5$ meV. Vemos que os pontos referentes às oscilações MIS se encontram muito próximos daqueles referentes ao efeito Shubnikov-de Haas, de modo que os efeitos devem na verdade se sobrepor, não possibilitando assim a identificação de picos na resistividade provenientes de cada efeito separadamente. 83
7.19 Valores do campo magnético B que geram os alinhamentos de níveis de energia relevantes para as oscilações MIS e Shubnikov-de Haas no caso $\Gamma = 0.4$ meV. Novamente, os pontos referentes às oscilações MIS se encontram muito próximos daqueles referentes ao efeito Shubnikov-de Haas, não possibilitando assim, como no caso anterior, a identificação de picos na resistividade provenientes de cada efeito separadamente. 84

Lista de Tabelas

2.1 Conjunto base truncado utilizado na construção do Hamiltoneano na forma matricial. Denotamos u_{n0} por u_n. 15

5.1 Parâmetros utilizados para os materiais binários. 51
5.2 Parâmetros de curvamento para as ligas ternárias. 52
5.3 Parâmetros para as ligas ternárias. 52

Sumário

1 Introdução **1**
1.1 Heteroestruturas 1
1.2 Interação spin-órbita em semicondutores 4
1.3 Spintrônica 5
1.4 Magnetotransporte e efeito Rashba em heteroestruturas 7
1.5 Resumo e organização do trabalho 9

2 O método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ aplicado à heteroestruturas **11**
2.1 Estrutura de bandas de semicondutores e o método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ . . . 11
2.2 Modelo de Kane 8x8 - caso *bulk* 13
2.3 Aproximação da Função Envelope 17
2.4 Modelo de Kane em heteroestruturas 21
2.5 Aproximação de Hartree 23

3 Interação spin-órbita em heteroestruturas **25**
3.1 *Folding-down* 25
3.2 Projeção nas sub-bandas da heteroestrutura 28
3.3 Análise de um dispositivo de spin baseado em tunelamento ressonante e efeito Rashba 31

4 Gás de elétrons bidimensional com campo magnético e efeito Rashba **36**
4.1 Estados eletrônicos sob campos magnéticos perpendiculares: níveis de Landau 36
4.2 Níveis de Landau em heteroestruturas 37
4.3 Níveis de Landau e efeito Rashba combinados em heteroestruturas 38
4.4 Efeito Shubnikov-de Haas 42
4.4.1 Tensores de condutividade e resistividade 43
4.4.2 Expressão para ρ_{xx} 46
4.5 Oscilações MIS 48

5 Detalhamento da heteroestrutura utilizada **49**
5.1 Parâmetros utilizados 49

6 Aspectos computacionais **53**
6.1 Formulação do problema 53
6.2 Cálculo autoconsistente 55
6.3 Métodos Numéricos 59
6.3.1 Algoritmo de Numerov 59
6.3.2 Equação de Schrödinger Unidimensional 60
6.3.3 Equação de Poisson para $V_{ee}(z)$ 62
6.4 Solução analítica da equação de Poisson para $V_d(z)$ 63
6.5 Cálculo da resistividade longitudinal $\rho_{xx}(B)$ 64

7 Resultados e Discussões **67**
7.1 Níveis de energia com campo magnético 71
7.2 Resistividade longitudinal 73
7.2.1 Caso $\Gamma = 1.5$ meV 73
7.2.2 Caso $\Gamma = 0.4$ meV 77
7.3 Análise qualitativa das oscilações MIS 82

8 Conclusões **85**

A Coeficientes da solução analítica da equação de Poisson para $V_d(z)$ **93**

Capítulo 1

Introdução

1.1 Heteroestruturas

O recente desenvolvimento das técnicas experimentais de crescimento de cristais com altos níveis de pureza permitiu um avanço na tecnologia de dispositivos semicondutores, possibilitando por exemplo a criação de transistores com elevada mobilidade eletrônica. Além disso, novos fenômenos físicos fundamentais puderam ser descobertos, como por exemplo o Efeito Hall Quântico Inteiro [1] e o Efeito Hall Quântico Fracionário [2], trabalhos que renderam prêmios Nobel de Física para seus autores.

Dentre os novos sistemas semicondutores que surgiram com esses avanços experimentais, destacam-se as heteroestruturas semicondutoras. Uma heteroestrutura semicondutora consiste basicamente da junção espacial de diferentes materiais semicondutores, crescidos de maneira adjacente. Os diferentes parâmetros e bandas de energia dos materiais que compõem uma heteroestrutura semicondutora nos permitem manipular o comportamento de elétrons e buracos através da chamada engenharia de bandas. Com ela, é possível criar sistemas semicondutores que apresentem características desejáveis para o desenvolvimento de variados dispositivos.

A figura 1.1 ilustra esquematicamente uma heteroestrutura típica: o poço quântico quadrado de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. A região do poço quântico é formada pelo material semicondutor GaAs, enquanto as regiões do espaçador e do *buffer* são compostas pela liga ternária $Al_xGa_{1-x}As$. Essa liga é obtida através da substituição aleatória de átomos de Ga por átomos de Al, de modo que proporção final entre os átomos de Al e Ga seja x. Além disso, esses dois materiais possuem camada de valência terminada nos orbitais s^2p^1, de modo que suas propriedades químicas são muito próximas. Como a substituição dos átomos é feita de forma aleatória, temos a quebra de perdiocidade do

cristal; no entanto, usamos a chamada Aproximação do Cristal Virtual, em que os efeitos do novo potencial não periódico são trocados por uma média ponderada por x dos potenciais dos dois materiais, resgatando assim a peridiocidade do cristal. Assim, teremos uma alteração suave das estruturas de banda e dos parâmetros do material inicial, tais como massa efetiva e constante de rede. A região do *buffer* é usada para minimizar os efeitos das impurezas existentes da região do substrato.

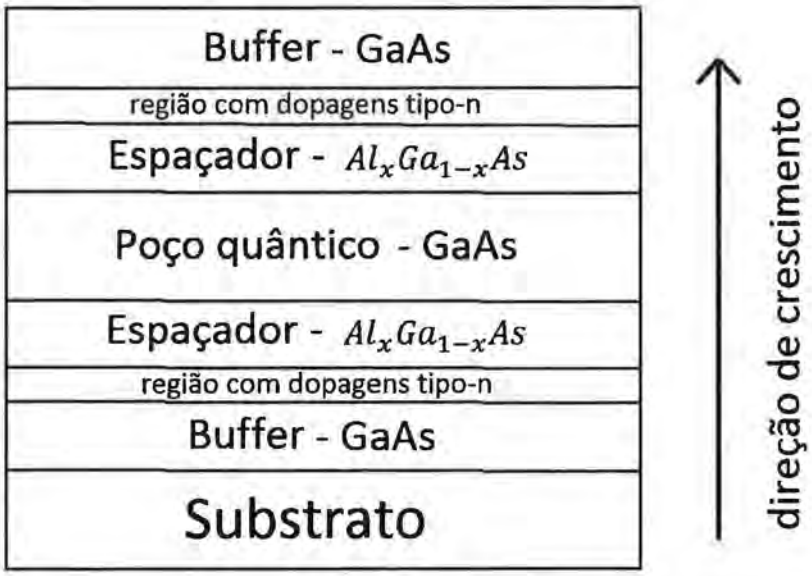

Figura 1.1: Representação esquemática de uma heteroestrutura semicondutora típica, consistindo de um poço quântico quadrado simples formado pela junção das ligas GaAs e $Al_xGa_{1-x}As$.

No caso específico do material $Al_xGa_{1-x}As$ teremos, por exemplo, o aumento do *gap* de energia no ponto Γ e o aumento da massa efetiva, em relação ao material GaAs. Com o aumento do *gap*, teremos naturalmente uma mudança relativa da posição do fundo da banda de condução e do topo da banda de valência; dessa forma, quando juntamos espacialmente os materiais GaAs e $Al_xGa_{1-x}As$, teremos efetivamente bandas de energia dependentes da posição, na direção de crescimento (ver figura 1.2). Assim, um elétron que eventualmente esteja no fundo da banda de condução do material $Al_xGa_{1-x}As$ irá minimizar sua energia, e passar a ocupar o fundo da banda de condução do material GaAs. O material GaAs atuará então como

um poço quântico na direção de crescimento, abrigando os elétrons provenientes do material $Al_xGa_{1-x}As$.

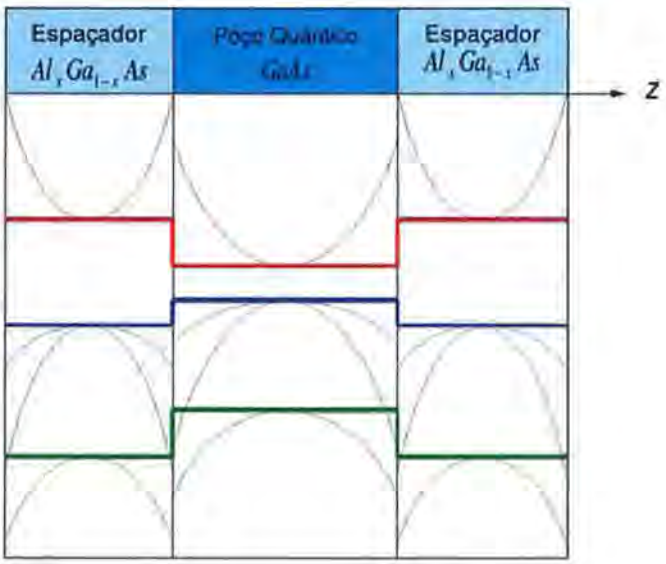

Figura 1.2: Estrutura de bandas ilustrativa na direção de crescimento da heteroestrutura. As linhas mais finais ilustram as bandas de energia propriamente ditas (espaço recíproco, direção k_z), enquanto as linhas mais espessas ilustram as descontinuidades estruturais de energia devido à presença de diferentes materiais (espaço real, direção z). Observamos a formação de poços quânticos para as bandas de condução e de valência na região do material GaAs (figura retirada da referência [33]).

Segundo as técnicas de dopagem modulada em semicondutores, podemos substituir aleatoriamente átomos de Ga ou de Al no material $Al_xGa_{1-x}As$ por átomos de materiais do grupo IV da tabela periódica (como Si, por exemplo) em regiões bem definidas da heteroestrutura (como a ilustrada na figura 1.1). Esses materiais introduzidos artificialmente são nesse caso chamados de impurezas tipo-n, pois possuem um elétron extra no fim da banda de valência, quando comparamos com a quantidade de elétrons no fim da banda de valência dos materiais que compõem a heteroestrutura originalmente. Esse elétron extra passará então a ocupar o fundo da banda de condução do material que recebeu as impurezas (chamado nesse caso de material dopado) e, posteriomente, passará ocupar a região do poço quântico (material GaAs), como dito. Esse processo criará estados ligados na direção de crescimento da

heteroestrutura; não obstante, o movimento desse elétron permanecerá livre nas direções perpendiculares à de crescimento e, se a região do espaçador for larga o suficiente para que as interações entre os elétrons no poço e as impurezas ionizadas sejam pequenas, teremos então a formação do chamado gás de elétrons bidimensional (2DEG, do inglês *2-Dimensional Electron Gas*).

1.2 Interação spin-órbita em semicondutores

Em Física Atômica, a interação spin-órbita surge de uma aproximação não-relativística da equação de Dirac [3], donde obtemos o chamado termo spin-órbita de Pauli:

$$H_{SO} = -\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\times(\nabla V_0)\,, \tag{1.1}$$

onde $\hbar$ é a constante de Planck dividida por 2π, m_0 é a massa do elétron livre, c é a velocidade da luz, $\boldsymbol{p}$ é o operador *momentum*, V_0 é o potencial Coulombiano dos núcleos e $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ é o vetor de matrizes de Pauli. Para descrever a interação spin-órbita em um sólido cristalino, basta trocarmos V_0 pelo potencial cristalino.

Uma justificativa qualitativa para a origem da interação spin-órbita surge se fizermos uma mudança de referencial. No referencial do elétron, o campo elétrico proveniente do núcleo transforma-se em um campo magnético, que acopla-se com o spin eletrônico, de maneira análoga à interação de Zeeman. Naturalmente, essa visão é apenas ilustrativa; a dedução correta deve considerar que o referencial do elétron é não-inercial.

Em um semicondutor, por exemplo, o efeito imediato da interação spin-órbita é gerar um desdobramento na banda de valência mais alta, constituindo assim uma interação importante na determinação das bandas de energia do material. A degenerescência de spin que pode existir nas demais bandas representa o efeito combinado de simetria de inversão no espaço e no tempo (esse último conhecido como degenerescência de Kramers). Ambas as operações de simetria mudam o vetor de onda $\boldsymbol{k}$ para $-\boldsymbol{k}$, mas a inversão temporal também muda o spin, de modo que quando combinamos ambas as operações

$$E_+(\boldsymbol{k}) = E_+(-\boldsymbol{k}) \quad \text{(inversão espacial)}$$

$$E_+(\boldsymbol{k}) = E_-(-\boldsymbol{k}) \quad \text{(inversão temporal)}$$

temos então

$$E_+(\boldsymbol{k}) = E_-(-\boldsymbol{k}), \tag{1.2}$$

onde os índices $+$ e $-$ referem-se à projeção do spin no sentido positivo ou negativo do eixo adotado, respectivamente.

Quando o potencial através do qual os portadores se movem é assimétrico por inversão espacial, no entanto, a degenerescência de spin é removida mesmo na ausência de um campo magnético externo. Desse modo, existem então dois ramos na relação de dispersão de uma banda: $E_+(\boldsymbol{k})$ e $E_-(\boldsymbol{k})$.

Em poços quânticos bidimensionais, presentes por exemplo em heteroestruturas, esse desdobramento de spin pode ser conseqüência de uma assimetria de inversão espacial da rede cristalina subjacente (chamado de desdobramento de spin BIA, do inglês *Bulk Inversion Asymmetry*), e/ou da assimetria de inversão espacial do potencial de confinamento (chamado de desdobramento de spin SIA, do inglês *Structural Inversion Asymmetry*) [4]. Naturalmente, o desdobramento de spin BIA existe também em sólidos em *bulk*, e não apenas em sistemas bidimensionais.

Como o potencial de confinamento de uma heteroestrutura pode ser sistematicamente controlado (através de aplicação de tensões de porta, por exemplo), podemos, a princípio, controlar o desdobramento de spin SIA. Esse mecanismo é de fato utilizado no desenvolvimento de dispositivos baseados no controle do grau de liberdade de spin - área conhecida como *spintrônica*.

1.3 Spintrônica

A spintrônica representa um recente e ativo campo de pesquisa da Física, que tem por objetivo controlar o grau de liberdade de spin para transportar informação [5–8]. Como o spin pode ser manipulado mais rapidamente e a um menor custo de energia que a carga, a spintrônica tem as vantagens potenciais de aumentar a velocidade do processamento de dados e diminuir a potência consumida. Outra vantagem da spintrônica é a não volatilidade, ou seja, o spin não mudará quando a potência fornecida ao dispositivo é interrompida. Essa propriedade permite o armazenamento de informação e o desenvolvimento de novos chips de memória.

O exemplo mais célebre de um dispositivo semicondutor baseado na spintrônica é o transistor de efeito de campo (*Spin Field Effect Transistor* - SpinFET) [9]. Tal dispositivo é similar ao transistor de efeito de campo convencional, mas com os eletrodos, dreno e fonte constituídos de um ferromagneto (ver figura 1.3). Pelo canal semicondutor, é aplicado um campo elétrico transverso cuja magnitude pode ser controlada por uma tensão de porta. Os portadores com polarização de spin deixam o eletrodo fonte com os spins paralelos à fonte de magnetização e precessam no caminho através do canal devido à chamada interação spin-órbita de Rashba [10] (ou simplesmente efeito Rashba), que corresponde a um tipo de desdobramento de spin SIA, conforme a seção anterior. Essa interação pode ser controlada pela

tensão de porta, de modo que a precessão do spin depende então da tensão de porta aplicada. Detalhes sobre o efeito Rashba serão dados no capítulo 3.

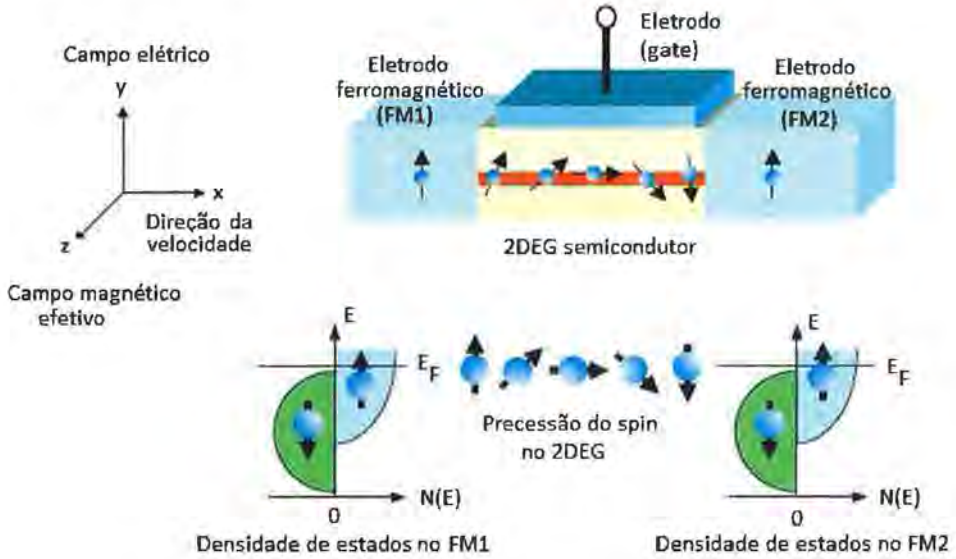

Figura 1.3: Representação do funcionamento do SpinFET. $N(E)$ denota a densidade de estados, E a energia e E_F a energia de Fermi. Através da aplicação sistemática da tensão de porta, podemos controlar a orientação do spin eletrônico quando esse atinge o dreno ferromagnético, e assim modular a corrente elétrica no dispositivo. O modo *off* (isto é, corrente nula) é ilustrado na figura.

Se a magnetização no dreno é paralela à magnetização da fonte e os portadores realizam um número N inteiro de precessões no caminho, então a condutividade do dispositivo será alta. No entanto, uma pequena modificação da tensão de porta muda a taxa de precessão, de modo que se o spin agora realizar $(N + 1/2)$ precessões no caminho a condutância do dispositivo é minimizada. O dispositivo resultante se comporta então como um transistor de efeito de campo padrão, mas com uma característica adicional: os eletrodos magnéticos respondem de modo diferente à aplicação de campos magnéticos externos.

Até o momento, a realização experimental do SpinFET ainda não foi possível. Os problemas técnicos que ainda precisam ser resolvidos para a implementação prática desse dispositivo estão essencialmente relacionados à eficiente injeção e detecção da corrente polarizada de spin e ao transporte dos portadores sem a perda dessa polarização. Não obstante, a proposta do

SpinFET gerou uma grande motivação para estudos teóricos e experimentais do efeito Rashba (ver [11–16] por exemplo), e representa atualmente uma área ativa de pesquisa na spintrônica.

Outros exemplos de dispositivos spintrônicos são filtros de spin [17, 18] e interferômetros de spin [19]. A seção 3.3 trata especificamente de um exemplo de filtro de spin baseado no efeito Rashba em sistemas na forma de diodo de tunelamento ressonante. Uma extensa revisão sobre fundamentos e aplicações de spintrônica pode ser encontrada em [20].

1.4 Magnetotransporte e efeito Rashba em heteroestruturas

Um dos métodos experimentais mais utilizados no estudo de heteroestruturas é a medida do magnetotransporte. Tal método consiste basicamente em medir a resistividade elétrica da amostra em direções diferentes em função de campos magnéticos e tensões de porta aplicadas. A análise mais comum feita com essas medidas refere-se ao chamado efeito Shubnikov-de Haas [21, 22], que corresponde à presença de oscilações na resistividade de um material em função da aplicação de um campo magnético. Essa análise é amplamente utilizada na caracterização de heteroestruturas, pois com ela podemos extrair experimentalmente a densidade eletrônica em um poço quântico (ver [23] por exemplo).

A figura (1.4) ilustra o efeito Shubnikov-de Haas. Ao aplicarmos um campo magnético na heteroestrutura, surgirão níveis de Landau no sistema, e, desconsiderando efeitos de spin, os níveis de energia serão então dados por

$$E_{il} = E_i + \hbar\omega_c^* \left(l + \frac{1}{2} \right), \tag{1.3}$$

onde $\omega_c^* = eB/m^*$ é a freqüência ciclotrônica, m^* é a massa efetiva do material em questão, e é a carga elétrica elementar, B é o campo magnético aplicado, i é o índice de sub-banda e l é o número quântico referente aos níveis de Landau.

Com o aumento sistemático de B, teremos a passagem sucessiva dos níveis de energia pelo nível de Fermi E_F. Sob temperaturas pequenas, o transporte eletrônico se dá no nível de Fermi; assim, assumindo que $\hbar\omega_c^* \ll E_F$, devemos esperar um pico na condutividade do material toda vez que uma passagem dessas ocorrer.[1] Tais picos ocorrerão de modo periódico em função de $1/B$,

[1]Lembrando que a condutividade σ e a resistividade ρ são tensores, e estão relacionados por $\sigma = \rho^{-1}$.

gerando assim uma oscilação na condutividade longitudinal do material. Esse efeito oscilatório é denominado efeito Shubnikov-de Haas. Naturalmente, para a observação desse efeito, devemos ter $\hbar\omega_c^*$ maior que o alargamento térmico dos níveis; por essa razão, devemos sempre ter temperaturas baixas ($\sim$ 1K). Cálculos e considerações mais detalhados sobre o efeito Shubnikov-de Haas serão dados no capítulo 4.

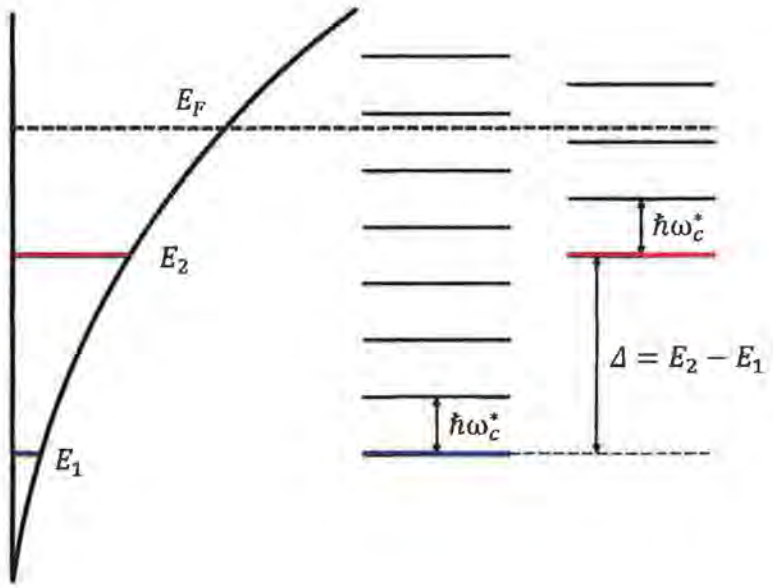

Figura 1.4: Níveis de energia de uma camada de inversão ilustrativa na presença de um campo magnético. Com o aumento de B, os níveis de energia irão sucessivamente cruzar o nível de Fermi E_F, gerando picos na condutividade do material. Notemos que a interação de Zeeman não é levada em conta.

Se além da aplicação do campo magnético na heteroestrutura tivermos também a presença do efeito Rashba, os autoestados de Landau estarão acoplados à autoestados de spin, e teremos níveis de energia dependentes tanto da orientação de spin quanto do campo magnético. Naturalmente, com a mudança nos níveis de energia do sistema, as oscilações da contudividade também deverão se comportar de forma diferente. Um exemplo de estudos teóricos e experimentais do efeito Shubnikov-de Haas na presença da interação de Rashba em heteroestruturas usando poços quadrados simples é encontrado em [24]. Nesse trabalho, existe apenas uma sub-banda ocupada. Se houver a ocupação da segunda sub-banda do poço surgirá então um termo de acoplamento spin-órbita intersub-banda devido à interação de Rashba [25].

Como veremos nos capítulos seguintes, esse termo torna a análise das medidas de magnetoresistência muito complicada, de modo que é conveniente encontrarmos sistemas em que esse termo seja desprezível. Segundo a referência [26], sistemas de poços quânticos quadrados duplos podem satisfazer essa condição, sendo assim adequados para nosso trabalho. Um trabalho experimental considerando duas sub-bandas ocupadas, efeito Rashba e campo magnético, mas em sistema de poço simples, é encontrado em [27].

A heteroestrutura escolhida para nossos estudos é formada pelos materiais $In_{0.52}Al_{0.48}As$ e $In_{0.53}Ga_{0.47}As$, pois seus parâmetros relevantes são bem caracterizados na literatura e suas constantes de rede são praticamente iguais [28]. Outro fator relevante é que, para o estudo do efeito Rashba, devemos poder desprezar os desdobramentos de spin tipo BIA (seção 1.2); cálculos teóricos serão apresentados no capítulo 7, mostrando que essa condição de fato é satisfeita, e justificando assim *a posteriori* a escolha desse material.

O transporte de corrente elétrica em um material condutor é fortemente dependente dos espalhamentos sofridos pelos portadores [29]. Quando por exemplo temos dois níveis de energia ocupados em ressonância, ocorrerá um forte espalhamento intersub-banda. A ocupação da segunda sub-banda possibilita o chamado espalhamento intersub-bandas magnéticas (MIS, do inglês *Magnetic Intersubband Scattering*), que gera um efeito oscilatório adicional na condutividade, que denominaremos oscilações MIS [30]. Tal espalhamento ocorre sempre que tivermos o alinhamento de dois níveis de Landau com índices de sub-banda diferentes. Matematicamente, tal condição é expressa por $\Delta = \hbar\omega_c^* p$ (segundo a figura 1.4), onde p denota um número natural. A importância desse efeito está no fato de ele persistir à temperaturas maiores (ao contrário do efeito Shubnikov-de Haas), e nos permitir a obtenção experimental da diferença de energia entre as sub-bandas da heteroestrutura. Até o presente momento, não existe na literatura nenhuma abordagem analítica para o estudo das oscilações MIS na presença do efeito Rashba; assim, consideraremos esse fenômeno de maneira breve e qualitativa nesse trabalho.

1.5 Resumo e organização do trabalho

Neste trabalho, estudaremos teoricamente as oscilações da resistividade longitudinal geradas pelo efeito Shubnikov-de Haas, considerando um sistema de poço duplo composto pela heteroestrutura $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$, com a presença do efeito Rashba. Apresentaremos também uma breve análise qualitativa das oscilações MIS. Esse estudo tem por finalidade fornecer algumas bases teóricas e auxiliar a interpretação de medidas de magnetotransporte na situação descrita. Além disso, analisamos criticamente uma proposta de dis-

positivo de spin baseado no efeito Rashba existente na literatura, apontando um equívoco nas hipóteses consideradas.

O capítulo 2 desenvolve as bases teóricas para o estudo de heteroestruturas. O capítulo 3 mostra a dedução do desdobramento de spin devido à assimetria espacial, e analisa criticamente uma proposta de dispositivo de spin baseado nessa interação existente na literatura. O capítulo 4 fornece a teoria para nosso estudo do efeito Shubnikov-de Haas com a presença do efeito Rashba em heteroestruturas com duas sub-bandas ocupadas. No capítulo 5 são descritos todos os parâmetros relevantes para nossos cálculos, bem como seus métodos de obtenção. O capítulo 6 descreve o procedimento do cálculo autoconsistente e os métodos numéricos utilizados. O capítulo 7 mostra e discute os resultados teóricos obtidos. Por fim, o capítulo 8 resume os resultados e cita as perspectivas existentes.

Capítulo 2

O método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ aplicado à heteroestruturas

O método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ consiste de uma abordagem semi-empírica que nos permite o cálculo com precisão arbitrária da estrutura de bandas de semicondutores em *bulk*, nas proximidades de um dado ponto do espaço recíproco. Aliado à chamada Aproximação da Função Envelope, o método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ nos permite obter também informações sobre heterojunções e heteroestruturas sob campos externos, que é parte essencial deste trabalho. Este capítulo tem por objetivo introduzir o método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ e descrever sua aplicação em heteroestruturas.

2.1 Estrutura de bandas de semicondutores e o método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$

A dedução do método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ é baseada na equação de Schrödinger para as funções de Bloch $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} u_{\nu\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \equiv e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \langle \boldsymbol{r} | \nu\boldsymbol{k} \rangle$ com o potencial cristalino microscópico de período da rede $V_0(\mathbf{r})$:

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_0} + V_0(\boldsymbol{r})\right] e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} u_{\nu\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = E_\nu(\boldsymbol{k}) e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} u_{\nu\boldsymbol{k}}, \tag{2.1}$$

onde m_0 é a massa do elétron em repouso, ν é o índice de banda e $E_\nu(\boldsymbol{k})$ denota as autoenergias.

Aplicando os operadores nas autofunções, obtemos então uma equação de Schrödinger apenas para as partes com período da rede $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$:

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_0} + V_0 + \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}\right] |\nu\boldsymbol{k}\rangle = E_\nu(\boldsymbol{k}) |\nu\boldsymbol{k}\rangle, \tag{2.2}$$

onde omitimos a dependência em $\boldsymbol{r}$ de V_0. O termo proporcional a $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ que surge na equação (2.2) justifica a denominação do método.

Notemos que $V_0(\boldsymbol{r})$ deve na verdade corresponder a uma *energia potencial* e não a um potencial. No entanto, usaremos tal denominação no restante deste trabalho, seguindo a convenção da literatura.

Se incluirmos a interação spin-órbita de Pauli, a equação (2.2) torna-se

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_0}+V_0+\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_0}+\frac{\hbar}{m_0}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\pi}+\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\times(\boldsymbol{\nabla}V_0)\right]|n\boldsymbol{k}\rangle=E_n(\boldsymbol{k})\,|n\boldsymbol{k}\rangle\,, \tag{2.3}$$

onde $\boldsymbol{\pi}\equiv\boldsymbol{p}+\frac{\hbar}{4m_0c^2}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{\nabla}V_0$, $|n\boldsymbol{k}\rangle$ são spinores de duas componentes e $\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ são as matrizes de Pauli, na notação usual. O índice n refere-se aos graus de liberdade orbitais e de spin.

Para o vetor de onda fixo $\boldsymbol{k}_0$, os conjuntos de funções com período da rede $\{|\nu\boldsymbol{k}_0\rangle\}$ e $\{|n\boldsymbol{k}_0\rangle\}$ fornecem uma base completa e ortonormal. Assim, podemos expandir os kets $\{|n\boldsymbol{k}\rangle\}$ em termos de funções de Bloch de centro de zona $\{|\nu\boldsymbol{0}\rangle\}$ vezes autoestados de spin $|\sigma\rangle$:

$$|n\boldsymbol{k}\rangle=\sum_{\nu',\sigma'}c_{n\nu'\sigma'}(\boldsymbol{k})\,|\nu'\sigma'\rangle\,, \tag{2.4}$$

onde $|\nu'\sigma'\rangle\equiv|\nu'\boldsymbol{0}\rangle\otimes|\sigma'\rangle$, e $\sigma'=\pm$ denota a orientação do spin segundo o eixo adotado.

Multiplicando a equação (2.3) por $\langle\nu\sigma|$ e usando (2.4), obtemos

$$\begin{aligned}\langle\nu\sigma|\Bigg[\Bigg(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_0}+V_0+\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_0}+\frac{\hbar}{m_0}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\pi}+\\ \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\times(\boldsymbol{\nabla}V_0)\Bigg)\sum_{\nu',\sigma'}c_{n\nu'\sigma'}(\boldsymbol{k})\,|\nu'\sigma'\rangle\Bigg]=\\ \langle\nu\sigma|\left(E_n(\boldsymbol{k})\sum_{\nu',\sigma'}c_{n\nu'\sigma'}(\boldsymbol{k})\,|\nu'\sigma'\rangle\right)\end{aligned} \tag{2.5}$$

ou

$$\begin{aligned}\sum_{\nu',\sigma'}\left[\left(E_{\nu'}(\boldsymbol{0})+\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_0}\right)\delta_{\nu\nu'}\delta_{\sigma\sigma'}+\frac{\hbar}{m_0}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{P}_{\nu\nu'\sigma\sigma'}+\Delta_{\nu\nu'\sigma\sigma'}\right]c_{n\nu'\sigma'}(\boldsymbol{k})=\\ E_n(\boldsymbol{k})c_{n\nu\sigma}(\boldsymbol{k}),\end{aligned} \tag{2.6}$$

com

$$\boldsymbol{P}_{\nu\nu'\sigma\sigma'}\equiv\langle\nu\sigma|\boldsymbol{\pi}|\nu'\sigma'\rangle\,, \tag{2.7}$$

$$\Delta_{\nu\nu'\sigma\sigma'} \equiv \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \langle \nu\sigma | \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times (\boldsymbol{\nabla} V_0) | \nu'\sigma' \rangle \,, \tag{2.8}$$

$$E_{\nu'}(\mathbf{0}) = \left\langle \nu'\sigma' \left| \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_0} + V_0 \right| \nu'\sigma' \right\rangle . \tag{2.9}$$

A equação (2.6) representa um problema de autovalores que depende explicitamente apenas de $\boldsymbol{k}$. Sua diagonalização fornece a relação de dispersão exata e os coeficientes da expansão $c_{n\nu\sigma}(\boldsymbol{k})$ para todos os valores de $\boldsymbol{k}$ e todos os índices de banda n. Os parâmetros $\boldsymbol{P}_{\nu\nu'\sigma\sigma'}$ e $\Delta_{\nu\nu'\sigma\sigma'}$ podem ser obtidos experimentalmente, tornando o método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ uma abordagem semi-empírica, como dito anteriormente.

Notemos que o método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ é válido para qualquer ponto $\boldsymbol{k}_0$ desejado. Utilizamos $\boldsymbol{k}_0 = \mathbf{0}$ na dedução apresentada aqui pois esse é o ponto do espaço recíproco que apresenta o menor *gap* de energias para os materiais relevantes para esse trabalho.

2.2 Modelo de Kane 8x8 - caso *bulk*

A heteroestrutura relevante para este trabalho é composta por semicondutores do tipo III-V. Esses materiais possuem estrutura cristalina do tipo *zincblende* (figura 2.1), onde as bandas de condução e valência relevantes surgem dos orbitais ligantes tipo-p e antiligantes tipo-s, respectivamente (figura 2.2).

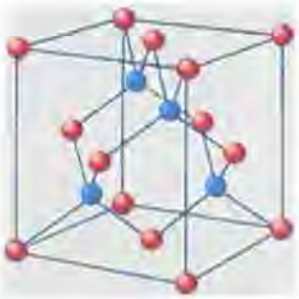

Figura 2.1: Estrutura cristalina *zincblende*. Se considerarmos a liga GaAs por exemplo, as esferas vermelhas corresponderão ao material Ga e as esferas azuis ao material As.

Como usual, para resolver a equação (2.6), temos que truncar o conjunto base, considerando apenas um número finito N de funções base de centro de zona $u_{n\mathbf{0}}(\boldsymbol{r}) \equiv \langle \boldsymbol{r} | n\mathbf{0} \rangle$, onde $|n\mathbf{0}\rangle \equiv |\nu\mathbf{0}\rangle \otimes |\sigma\rangle$. Dada a natureza da ligação química na estrutura *zincblende*, usaremos apenas $N = 8$ funções: duas

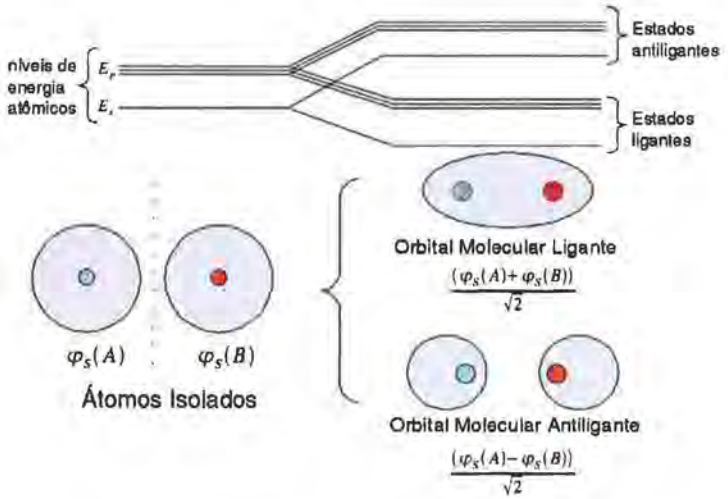

Figura 2.2: Formação ilustrativa de orbitais ligantes e anti-ligantes (figura retirada da referência [33]). Orbitais degenerados de átomos isolados ($\varphi_S(A)$ e $\varphi_S(B)$) se aproximam, dando origem a dois novos estados. Aquele com densidade eletrônica maior na região entre os átomos possui energia mais baixa, e é por isso denominado orbital ligante. Aquele com densidade eletrônica menor na região entre os átomos possui energia maior, e é denominado orbital anti-ligante.

correspondentes à banda de condução (estados $|S\rangle \otimes |\pm\rangle$) e 6 correspondentes às 3 bandas de valência mais altas (estados $|P_i\rangle \otimes |\pm\rangle$, com $i = x, y, z$). Essa escolha corresponde ao chamado modelo de Kane [31].

O acoplamento entre as bandas que compõem nossa base se dá através dos parâmetros $\boldsymbol{P}_{\nu\nu'\sigma\sigma'}$ e $\Delta_{\nu\nu'\sigma\sigma'}$, como pode ser visto na equação (2.6). Esses parâmetros estão ligados à interação spin-órbita, de modo que é conveniente escolhermos combinações lineares das funções da base $|S\rangle \otimes |\pm\rangle$ e $|P_i\rangle \otimes |\pm\rangle$ que sejam autoestados do momento angular total $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$, e sua componente no eixo z, J_z. Aqui, $\boldsymbol{L}$ e $\boldsymbol{S}$ denotam o momento angular orbital e de spin, respectivamente.

A tabela (2.1) resume o conjunto das oito funções de onda de centro de zona que consideramos aqui, além dos autoestados $|J, m_j\rangle$ associados. Elas correspondem às funções $u_{n\mathbf{0}}$, que são autoestados da equação (2.3), fazendo $\boldsymbol{k} = \mathbf{0}$ (lembrando que $|n\mathbf{0}\rangle \equiv |\nu\mathbf{0}\rangle \otimes |\sigma\rangle$). A construção dessas funções em termos das funções base $|S\rangle \otimes |\pm\rangle$ e $|P_i\rangle \otimes |\pm\rangle$ pode ser encontrada na referência [32].

Usando a base ordenada $u_1, ..., u_8$ mostrada na tabela (2.1), podemos construir o Hamiltoneano implícito em (2.6) na forma matricial

u_n	Γ	$\lvert J, m_J\rangle$	u_{J,m_J}
u_1	Γ_6	$\lvert\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\rangle$	$i\lvert S\rangle \otimes \lvert+\frac{1}{2}\rangle$
u_2	Γ_6	$\lvert\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$	$i\lvert S\rangle \otimes \lvert-\frac{1}{2}\rangle$
u_3	Γ_8	$\lvert\frac{3}{2},+\frac{3}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert X\rangle + i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert+\frac{1}{2}\rangle$
u_4	Γ_8	$\lvert\frac{3}{2},+\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}(\lvert X\rangle + i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert-\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\lvert Z\rangle \otimes \lvert+\frac{1}{2}\rangle$
u_5	Γ_8	$\lvert\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle$	$+\frac{1}{\sqrt{6}}(\lvert X\rangle - i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert+\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\lvert Z\rangle \otimes \lvert-\frac{1}{2}\rangle$
u_6	Γ_8	$\lvert\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\rangle$	$+\frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert X\rangle - i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert-\frac{1}{2}\rangle$
u_7	Γ_7	$\lvert\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}(\lvert X\rangle + i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert-\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\lvert Z\rangle \otimes \lvert+\frac{1}{2}\rangle$
u_8	Γ_7	$\lvert\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}(\lvert X\rangle - i\lvert Y\rangle) \otimes \lvert+\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\lvert Z\rangle \otimes \lvert-\frac{1}{2}\rangle$

Tabela 2.1: Conjunto base truncado utilizado na construção do Hamiltoneano na forma matricial. Denotamos $u_{n\mathbf{0}}$ por u_n.

$$H_{8\times 8} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_- & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_- \\ 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_- & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}-E_g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_- & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}-E_g & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}-E_g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}-E_g & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}-E_g-\Delta_g & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}-E_g-\Delta_g \end{pmatrix} \tag{2.10}$$

onde P é o elemento de matriz de Kane usual

$$P = i\frac{\hbar}{m_0}\langle S|p_x|X\rangle = \hbar\sqrt{\frac{E_p}{2m_0}}, \tag{2.11}$$

escrito em termos do parâmetro E_p e $k_\pm = k_x \pm ik_y$. Também usamos o fato que $\langle S|p_x|X\rangle = \langle S|p_y|Y\rangle = \langle S|p_z|Z\rangle$.

A equação (2.10) representa o chamado Hamiltoneano de Kane 8x8, que descreve as bandas de condução tipo-s e de valência tipo-p ao redor do ponto Γ em compostos *zincblende*. A diagonalização desse Hamiltoneano dá as relações de dispersão $E_n(\boldsymbol{k})$ ao redor do ponto Γ. Os elementos na diagonal correspondem às autoenergias $E_{\nu'}(\mathbf{0})$ da equação (2.6): $E_1(\mathbf{0}) = E_2(\mathbf{0}) = 0$

(estados da banda de condução, definidos como o zero da energia), $E_3(\mathbf{0}) = E_4(\mathbf{0}) = E_5(\mathbf{0}) = E_6(\mathbf{0}) = -E_g$ (bandas dos buracos leve e pesados, com E_g denotando o *gap* de energia do material), e $E_7(\mathbf{0}) = E_8(\mathbf{0}) = -E_g - \Delta_g$ (banda *split-off*). Aqui,

$$\Delta_g = \frac{3\hbar^2}{4m_0^2c^2}\left\langle X \left| \frac{\partial V}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y} \right| Y \right\rangle \tag{2.12}$$

é o parâmetro spin-órbita "atômico", definindo o *split-off gap* (ver figura 2.3).

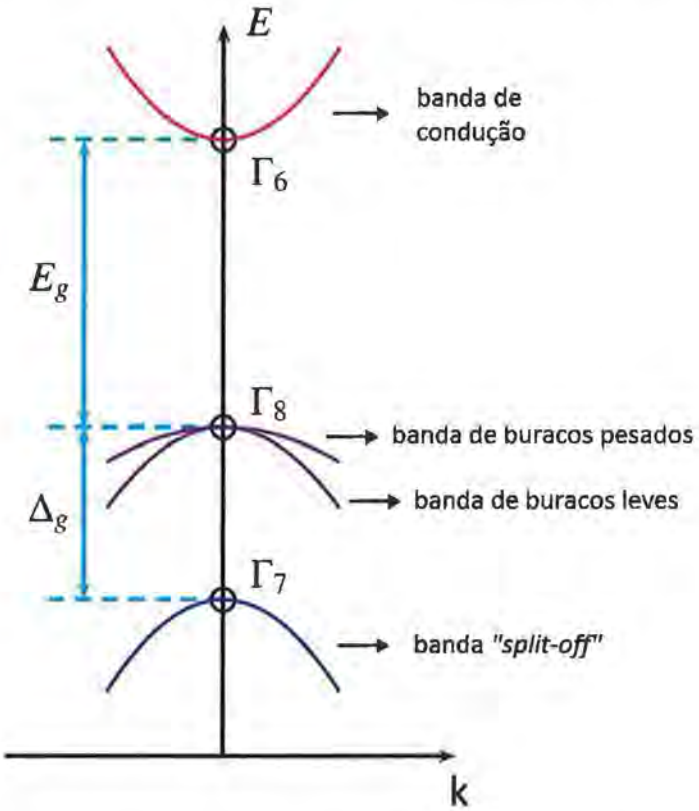

Figura 2.3: Bandas de energia consideradas no modelo de Kane 8x8.

O modelo de Kane 8x8 aqui apresentando trata exatamente os acoplamentos das bandas de condução e valência dentro do conjunto truncado de oito funções de onda das extremidades de bandas. No entanto, é importante enfatizar que ignoramos contribuições do termo spin-órbita dependente de $\boldsymbol{k}$ na equação (2.6) quando construímos o Hamiltoneano na forma matricial. Dessa forma, temos $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p}$ em (2.7), e o elemento de matriz de Kane P na equação (2.10) corresponde a $\delta_{\sigma\sigma'}\boldsymbol{P}_{\nu\nu'}$ da equação (2.7). Assim, a interação

spin-órbita é levada em conta, em primeira aproximação, apenas no centro da zona ($\boldsymbol{k} = \mathbf{0}$), através da inclusão do parâmetro Δ_g.

Notemos que é sabido que o modelo de Kane utilizado aqui não é preciso para bandas de valência [34]; no entanto, ele fornece uma descrição simplificada e precisa para os elétrons de condução, que é o foco de nosso trabalho.

2.3 Aproximação da Função Envelope

As deduções das seções 2.1 e 2.2 são válidas para materiais em *bulk*, ou seja, materiais que são espacialmente periódicos e idealmente infinitos. Em heteroestruturas, no entanto, essas hipóteses não são válidas, pois temos a quebra da peridiocidade do cristal, dada a existência de interfaces de materiais diferentes. Por essas razões, não podemos mais usar o teorema de Bloch. A teoria desenvolvida para descrever tais sistemas é chamada de Aproximação da Função Envelope (sigla EFA, do inglês *Envelope Function Approximation*) [34]. A EFA nos permite descrever estados de elétrons e buracos na presença de campo elétricos e magnéticos que variam lentamente na escala espacial da constante de rede. Esses campos podem ser internos (como os campos de defeitos cristalinos), ou campos aplicados externamente, por meio de, por exemplo, contatos elétricos.

Na dedução seguinte, assumiremos que os materiais A e B que constituem uma heteroestrutura arbitrária possuem constantes de rede com valores próximos o suficiente para que os efeitos de deformação estrutural possam ser desprezados e que ambos possuem a mesma estrutura cristalina. As hipóteses básicas da EFA são:

i) Dentro de cada material as funções de onda são expandidas em termos das partes periódicas das funções de Bloch do ponto $\boldsymbol{k}_0$ em questão

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \sum_l f_l^{(A)}(\boldsymbol{r}) u_{l,\boldsymbol{k}_0}^{(A)}(\boldsymbol{r}) \tag{2.13}$$

se $\boldsymbol{r}$ corresponde ao material A e

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \sum_l f_l^{(B)}(\boldsymbol{r}) u_{l,\boldsymbol{k}_0}^{(B)}(\boldsymbol{r}) \tag{2.14}$$

se $\boldsymbol{r}$ corresponde ao material B. Nas equações (2.13) e (2.14), $\boldsymbol{k}_0$ é o ponto da zona de Brillouin ao redor do qual os autoestados são construídos, e o somatório em l se dá sobre a quantidade de bandas desejadas na análise.

ii) A parte periódica das funções de Bloch é assumida idêntica nos materiais que compõem a heteroestrutura:

$$u_{l,\boldsymbol{k}_0}^{(A)}(\boldsymbol{r}) \equiv u_{l,\boldsymbol{k}_0}^{(B)}(\boldsymbol{r}), \tag{2.15}$$

que é uma hipótese razoável, uma vez que estamos considerando materiais de mesma estrutura cristalina e constantes de rede muito próximas.

Em nosso caso, usaremos o ponto Γ ($\boldsymbol{k}_0 = \mathbf{0}$), que é o ponto de *gap* fundamental dos materiais que consideraremos, como dito anteriormente. Assim, temos

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \sum_l f_l^{(A)}(\boldsymbol{r}) u_{l\mathbf{0}}^{(A)}(\boldsymbol{r}) \tag{2.16}$$

se $\boldsymbol{r}$ corresponde ao material A e

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \sum_l f_l^{(B)}(\boldsymbol{r}) u_{l\mathbf{0}}^{(B)}(\boldsymbol{r}) \tag{2.17}$$

se $\boldsymbol{r}$ corresponde ao material B.

Dessa forma, usando (2.15), a função de onda de nossa heteroestrutura é escrita como

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \sum_l f_l^{(A,B)}(\boldsymbol{r}) u_{l\mathbf{0}}(\boldsymbol{r}) \tag{2.18}$$

e nosso objetivo é determinar $f_l^{(A,B)}(\boldsymbol{r})$.

A suposição de que $u_{l\mathbf{0}}^{(A)}(\boldsymbol{r}) = u_{l\mathbf{0}}^{(B)}(\boldsymbol{r})$ implica que elementos de matriz de Kane $P = \langle S | p_i | i \rangle$, $i = x, y, z$, são idênticos nos materiais A e B. Seja o plano $z = z_0$ a interface separando os materiais A e B (com o crescimento assumido na direção z). Como as funções $u_{l,\mathbf{0}}$ são linearmente independentes e como $\Psi(\boldsymbol{r})$ deve ser contínua em $z = z_0$ temos

$$f_l^{(A)}(\boldsymbol{r}_\parallel, z_0) = f_l^{(B)}(\boldsymbol{r}_\parallel, z_0), \tag{2.19}$$

onde $\boldsymbol{r}_\parallel = (x, y)$.

Como o valor das constantes de rede dos materiais é assumido muito próximo, a heteroestrutura torna-se translacionalmente invariante no plano $x - y$, de modo que as funções f_l se fatorizam em

$$f_l^{(A,B)}(\boldsymbol{r}_\parallel, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\boldsymbol{k}_\parallel \cdot \boldsymbol{r}_\parallel} \varphi_l^{(A,B)}, \tag{2.20}$$

onde S é a área da amostra no plano $x - y$ e $\boldsymbol{k}_\parallel = (k_x, k_y)$ é um vetor bidimensional que é idêntico nos materiais A e B para satisfazer a invariância translacional.

Denotaremos por $\epsilon_{l\mathbf{0}}^{(A)}, \epsilon_{l\mathbf{0}}^{(B)}$ as energias do l-ésimo extremo de banda no centro da zona dos materiais A e B respectivamente. Também assumiremos que para todo l as funções $\varphi_l^{(A,B)}(z)$ variam lentamente na escala da célula unitária dos materiais.

Assim, a função de onda da heteroestrutura $\Psi(\boldsymbol{r})$ é a soma dos produtos de funções que variam rapidamente: as u_{l0} (que são periódicas com peridiocidade da rede cristalina do material), e as *funções envelope* f_l, que variam lentamente nessa escala. Um exemplo pode ser visto na figura (2.4).

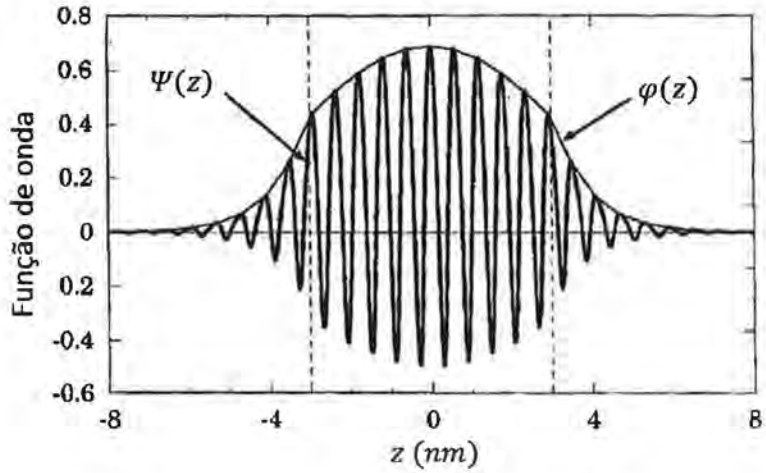

Figura 2.4: Exemplo genérico de uma função de onda para o estado fundamental em um poço quadrado de 6 nm em uma heteroestrutura. A linha mais fina corresponde à componente na direção z da função envelope ($\varphi_0(z)$), enquanto a linha mais espessa corresponde à função de onda nessa direção ($\Psi_0(z)$).

Para simplificar a notação, escrevemos o Hamiltoniano da heteroestrutura na forma

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V_A(\boldsymbol{r})\Theta_A(\boldsymbol{r}) + V_B(\boldsymbol{r})\Theta_B(\boldsymbol{r}), \tag{2.21}$$

onde $V_A(\boldsymbol{r})$ e $V_B(\boldsymbol{r})$ são os potenciais cristalinos no material A e B respectivamente, e $\Theta_A(\boldsymbol{r})$ ($\Theta_B(\boldsymbol{r})$) é a função degrau, que é igual a 1 se $\boldsymbol{r}$ corresponde a uma posição no material A (no material B). Assim, temos

$$Hu_{l0}(\boldsymbol{r}) = (\epsilon_{l0}^{(A)}\Theta_A + \epsilon_{l0}^{(B)}\Theta_B)u_{l0}(\boldsymbol{r}). \tag{2.22}$$

Agora atuamos H em $\Psi(\boldsymbol{r})$, multiplicamos por $u_{m0}^*(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{k}_\parallel\cdot\boldsymbol{r}_\parallel}\varphi_m^{*(A,B)}(z)$ e integramos no espaço, obtendo o conjunto de equações de autovalor [34]:

$$\left[\left(\epsilon_{l0}^{(A)}\Theta_A + \epsilon_{l0}^{(B)}\Theta_B + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\delta_{lm} + \frac{\hbar \boldsymbol{k}_\parallel}{m_0}\langle l|\,\boldsymbol{p}_\parallel\,|m\rangle - \frac{i\hbar}{m_0}\langle l|\,\boldsymbol{p}_z\,|m\rangle\frac{\partial}{\partial z}\right]\boldsymbol{\varphi} = \epsilon\boldsymbol{\varphi}, \tag{2.23}$$

onde

$$\langle l|\,\boldsymbol{p}\,|m\rangle = \int_{\Omega_0} u_{l0}^* \boldsymbol{p} u_{m0} \mathrm{d}^3 r, \tag{2.24}$$

Ω_0 é o volume da célula unitária do material, $\boldsymbol{\varphi}$ é um vetor coluna de N dimensões, N é o número de extremo de bandas utilizado no cálculo e ϵ é a energia do sistema. Cada nível de energia ϵ corresponde a uma chamada *sub-banda elétrica* (ou simplesmente *sub-banda*) do sistema, pois resulta da existência de um potencial artificial - o potencial relacionado ao crescimento da heteroestrutura. Essa denominação surge da analogia com as bandas de energia em cristais, que são relacionadas ao potencial cristalino.

Podemos ver que essa equação é semelhante à equação (2.6) (proveniente do método $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ para materiais em *bulk*), exceto por duas diferenças: k_z é substituído por $-i\frac{\partial}{\partial z}$ e as energias ϵ_{l0} são agora dependentes da posição e variam como uma função degrau.

Ao invés de usarmos $\epsilon_{l0}^{(A)}$ e $\epsilon_{l0}^{(B)}$, podemos denotar por V_l a mudança de energia do l-ésimo extremo de banda quando passamos do material A para o material B e definir as funções degrau $V_l(z)$ por

$$V_l(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } z \text{ corresponde ao material A,} \\ \epsilon_{l0}^{(B)} - \epsilon_{l0}^{(A)} & \text{se } z \text{ corresponde ao material B.} \end{cases} \tag{2.25}$$

No caso em que aplicamos na heteroestrutura um potencial externo $V_{ext}(z)$ que varia lentamente na escala da célula unitária dos materiais (como por exemplo, um campo elétrico constante), a equação (2.23) é modificada pela adição de um termo $V_{ext}(z)\mathbb{I}$, onde $\mathbb{I}$ é a matriz identidade $N\times N$. De maneira análoga, se V_{ext} é função de $\boldsymbol{r}$, a equação (2.23) torna-se

$$\left[\left(\epsilon_{l0}^{(A)} + V_l(z) - \frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\right)\delta_{l,m} + V_{ext}(\boldsymbol{r})\mathbb{I} - \frac{i\hbar}{m_0}\langle l|\,\boldsymbol{p}\,|m\rangle\cdot\nabla\right]\boldsymbol{f} = \epsilon\boldsymbol{f}, \tag{2.26}$$

onde $\boldsymbol{f} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{r})$ é uma função envelope de N dimensões.

Uma dedução mais detalhada da equação (2.26) pode ser encontrada em [33].

2.4 Modelo de Kane em heteroestruturas

Para escrever a matriz de Kane (equação 2.10) para uma heteroestrutura, devemos fazer a correspondência entre o método $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ e a EFA. Se a direção de crescimento da heteroestrutura é a direção z, devemos fazer $k_z \to -i\frac{\partial}{\partial z}$ e introduzir as energias ϵ_{l0} dos centros de zona como dependentes de z, como visto na seção anterior. Assim, na presença de um potencial externo total $V(z)$, a matriz de Kane para uma heteroestrutura é dada por

$$H_{8\times 8} = \begin{pmatrix} E_c & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_- & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_- \\ 0 & E_c & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_- & 0 & E_v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_- & 0 & E_v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & 0 & 0 & E_v & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & 0 & 0 & 0 & E_v & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & E_\Delta & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_\Delta \end{pmatrix}, \tag{2.27}$$

onde $\boldsymbol{k}_\parallel^2 = k_x^2 + k_y^2$ e

$$E_c \equiv \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + V(z), \tag{2.28}$$

$$E_v \equiv \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_v(z) + V(z) - E_g, \tag{2.29}$$

$$E_\Delta \equiv \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_\Delta(z) + V(z) - E_g - \Delta_g. \tag{2.30}$$

Os potenciais $V_c(z), V_v(z)$ e $V_\Delta(z)$ são os potencias internos da heteroestrutura, e denotam, respectivamente, as descontinuidades estruturais na banda de condução, banda de valência de buracos leves e pesados, e banda de valência *split-off*, definidos de maneira análoga a (2.25). A heteroestrutura estudada nesse trabalho corresponde a um sistema de poço quadrado duplo; assim, podemos definir os potenciais $V_c(z), V_v(z)$ e $V_\Delta(z)$ de acordo com a figura (2.5).

Sejam L_w a largura total do poço e L_b a largura da região da barreira central. Dessa forma, assumindo o zero da energia no fundo da banda de condução do material de menor *gap*, temos

$$V_c(z) = \begin{cases} \delta_6 & \text{se } |z| \geq L_w/2, \\ 0 & \text{se } |z| \leq L_w/2 \text{ e } |z| > L_b/2, \\ \delta_{b6} & \text{se } |z| < L_b/2. \end{cases} \tag{2.31}$$

$$V_v(z) = \begin{cases} -E_g - \delta_8 & \text{se } |z| \geq L_w/2, \\ -E_g & \text{se } |z| \leq L_w/2 \text{ e } |z| > L_b/2, \\ -E_g - \delta_{b8} & \text{se } |z| < L_b/2. \end{cases} \tag{2.32}$$

$$V_\Delta(z) = \begin{cases} -E_g - \Delta_g - \delta_7 & \text{se } |z| \geq L_w/2, \\ -E_g - \Delta_g & \text{se } |z| \leq L_w/2 \text{ e } |z| > L_b/2, \\ -E_g - \Delta_g - \delta_{b7} & \text{se } |z| < L_b/2. \end{cases} \tag{2.33}$$

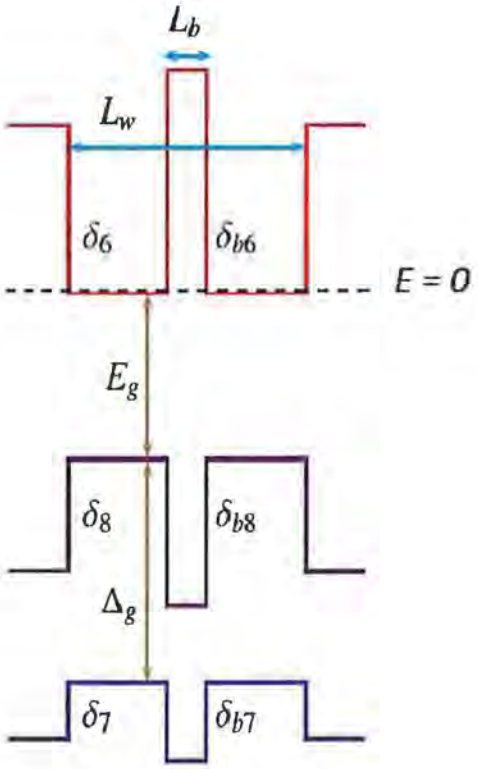

Figura 2.5: Descontinuidades das bandas da heteroestrutura. O zero da energia é tomado no fundo da banda de condução.

No caso do potencial externo $V(z)$, teremos um termo $V_{ee}(z)$ proveniente da interação dos elétrons que com compõem o 2DEG e um termo $V_d(z)$ proveniente da interação do 2DEG com as impurezas ionizadas, além da eventual inclusão de tensões de porta. Utilizaremos a aproximação de Hartree para descrever esses potenciais e calcular a função de onda eletrônica, de modo que interações de troca e correlação serão ignoradas. A forma de $V(z)$, bem como o detalhamento das aproximações envolvidas, serão dados nas seções 2.5 e 6.1.

2.5 Aproximação de Hartree

Para descrever o potencial externo $V(z)$ presente na equação (2.27), utilizaremos a chamada Aproximação de Hartree. Nessa aproximação, desprezamos efeitos de troca e correlação eletrônica, e escrevemos a função de onda total do 2DEG como um produto de funções de onda de um único elétron:

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, ..., \boldsymbol{r}_N) = \psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_1(\boldsymbol{r}_2)...\psi_N(\boldsymbol{r}_N), \tag{2.34}$$

onde N é o número de elétrons no 2DEG. Notemos que já utilizamos aqui a chamada aproximação Adiabática.[1]

Em nosso caso, o Hamiltoneano para os elétrons é dado por

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m_0} + u(\boldsymbol{r}_i) + \sum_{j=1, j\neq i}^{N} V(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j) \right) \tag{2.35}$$

onde $u(\boldsymbol{r}_i)$ denota o potencial de interação com os íons da rede cristalina e $V(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j)$ denota o potencial de interação entre os elétrons i e j. Aqui, já aplicamos a aproximação de Born-Oppenheimer.[2]

Utilizando a função de onda dada em (2.34), obtemos através de cálculos variacionais que o potencial que minimiza a energia do Hamiltoneano acima é (ver páginas 39 e 40 da referência [33] por exemplo):

$$V_H(\boldsymbol{r}) = \sum_i \int |\psi_i(\boldsymbol{r}')|^2 V(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \mathrm{d}\boldsymbol{r}', \tag{2.36}$$

que é o chamado potencial de Hartree.

Se considerarmos que os elétrons interagem através da interação de Coulomb, temos então

$$V_H(\boldsymbol{r}) = \frac{e^2}{4\pi\kappa} \sum_i^N \int \frac{|\psi_i(\boldsymbol{r}')|^2}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} \mathrm{d}\boldsymbol{r}', \tag{2.37}$$

onde e denota a carga do elétron e κ denota a permitividade elétrica do material.

Uma outra maneira de representar V_H é notar que ele é solução de uma equação de Poisson:

$$\nabla^2 V_H(\boldsymbol{r}) = \frac{e^2}{\kappa} n(\boldsymbol{r}), \tag{2.38}$$

[1] A aproximação Adiabática consiste em considerar a função de onda nuclear (ou iônica) e a função de onda eletrônica separáveis, devido à grande diferença na velocidade dos dois tipos de partículas.

[2] A aproximação de Born-Oppenheimer consiste em desprezar os efeitos da variação da posição dos núcleos (ou íons) na função de onda eletrônica.

onde $n(\boldsymbol{r})$ representa a densidade eletrônica, dada por $n(\boldsymbol{r}) = \sum_i^N f_{FD} \, |\psi_i(\boldsymbol{r})|^2$, com f_{FD} representando a função de distribuição de Fermi-Dirac. Assim, uma outra maneira de interpretar a aproximação de Hartree é considerar que cada elétron interage com a densidade eletrônica total por meio de uma interação eletrostática.

A expressão de V_H que utilizaremos será dada na seção 6.1.

Capítulo 3

Interação spin-órbita em heteroestruturas

Utilizando o formalismo desenvolvido no capítulo anterior, deduzimos aqui um Hamiltoneano efetivo para os elétrons na banda de condução da heteroestrutura, obtendo uma expressão para o desdobramento de spin induzido por assimetria de inversão estrutural. Posteriormente, discutimos uma proposta de dispositivo de spin baseada nessa interação existente na literatura. As deduções das seções 3.1 e 3.2 foram retiradas da referência [26].

3.1 *Folding-down*

O Hamiltoneano 8x8 da equação (2.10) pode ser transformado num Hamiltoneano efetivo 2x2 que descreve os elétrons da banda de condução, por meio de um processo denominado *folding down*. Para isso, começamos reescrevendo o Hamiltoneano 8x8 na forma de blocos:

$$H_{8\times 8} = \begin{pmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{cv}^{\dagger} & H_v \end{pmatrix}, \tag{3.1}$$

onde

$$H_c = \left[\frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_{\parallel}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + V(z)\right] \mathbb{I}_{2\times 2}, \tag{3.2}$$

$$H_v = \begin{pmatrix} \left[\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_v(z) + V(z) - E_g\right] \mathbb{I}_{4\times 4} & 0 \\ 0 & \left[\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_\Delta(z) + V(z) - E_g - \Delta_g\right] \mathbb{I}_{2\times 2} \end{pmatrix}, \tag{3.3}$$

e

$$H_{cv} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_- & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_- \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z \end{pmatrix}. \tag{3.4}$$

Usando a representação em blocos do Hamiltoneano dada em (3.1), podemos escrever o problema de autovalores de uma forma compacta:

$$\begin{pmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_c \\ \varphi_v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_c \\ \varphi_v \end{pmatrix}, \tag{3.5}$$

onde φ_c é um spinor de duas componentes (banda de condução), φ_v é um spinor de seis componentes (banda de valência) e E é uma autoenergia.

O sistema de equações (3.5) nos leva facilmente a

$$\mathcal{H}(E)\tilde{\varphi}_c = E\tilde{\varphi}_c, \tag{3.6}$$

com

$$\mathcal{H}(E) = H_c + H_{cv}(E - H_v)^{-1}H_{cv}^\dagger, \tag{3.7}$$

e $\tilde{\varphi}_c$ um spinor adequadamente renormalizado.

Os elementos de matriz de $\mathcal{H}(E)$ são [26]

$$\mathcal{H}(E)_{11} = \mathcal{H}(E)_{22} = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} + V_c(z) + V(z) + \frac{P^2}{3}(\boldsymbol{k}_\parallel^2 \gamma_1(z) + k_z\gamma_1(z)k_z) \tag{3.8}$$

e

$$\mathcal{H}(E)_{12} = \mathcal{H}(E)_{21}^\dagger = -\frac{P^2}{3}k_- k_z \gamma_2(z), \tag{3.9}$$

onde $k_\pm = k_x \pm ik_y$, $\boldsymbol{k}_\parallel^2 = k_x^2 + k_y^2$, $k_z = -i\frac{\partial}{\partial z}$,

$$\gamma_1(z) = \left(\frac{2}{E - \left[\frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} + V_v(z) + V(z) - E_g\right]} + \frac{1}{E - \left[\frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} + V_\Delta(z) + V(z) - E_g - \Delta_g\right]} \right) \tag{3.10}$$

e

$$\gamma_2(z) = \left(\frac{1}{E - \left[\frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} + V_v(z) + V(z) - E_g\right]} - \frac{1}{E - \left[\frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} + V_\Delta(z) + V(z) - E_g - \Delta_g\right]} \right). \tag{3.11}$$

A equação (3.6) é uma espécie de equação de Schrödinger, com um Hamiltoneano efetivo para os elétrons de condução $\mathcal{H}(E)$. No entanto, ela não representa uma equação de autovalores de fato, pois $\mathcal{H}$ depende de E. Podemos, no entanto, obter uma equação de autovalores através de algumas expansões.

Supondo que E_g e Δ_g sejam as maiores escalas de energia de nosso sistema[1], as quantidades

$$\chi_8 = \frac{E - \left[\frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} + V_v(z) + V(z)\right]}{E_g} \tag{3.12}$$

e

$$\chi_7 = \frac{E - \left[\frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} + V_\Delta(z) + V(z)\right]}{E_g + \Delta_g} \tag{3.13}$$

devem ser muito menores que a unidade. Assim, podemos expandir os coeficientes $\gamma_1(z)$ e $\gamma_2(z)$ na forma

$$\gamma_1(z) = \left(\frac{2}{E_g}\right)\frac{1}{1+\chi_8} + \left(\frac{1}{E_g+\Delta_g}\right)\frac{1}{1+\chi_7} = \frac{2}{E_g}(1-\chi_8+...) + \frac{1}{E_g}(1-\chi_7+...), \tag{3.14}$$

$$\gamma_2(z) = \left(\frac{1}{E_g}\right)\frac{1}{1+\chi_8} - \left(\frac{1}{E_g+\Delta_g}\right)\frac{1}{1+\chi_7} = \frac{1}{E_g}(1-\chi_8+...) - \frac{1}{E_g}(1-\chi_7+...). \tag{3.15}$$

Para os elementos da diagonal $\mathcal{H}(E)_{11} = \mathcal{H}(E)_{22}$ tomamos apenas os termos de ordem zero da expansão, enquanto para os elementos fora da diagonal $\mathcal{H}(E)_{12} = \mathcal{H}(E)_{21}^\dagger$ tomamos em adição os termos de primeira ordem da expansão, pois eles fornecem a menor contribuição não nula (uma vez que

[1]Notemos que isso é equivalente a nos mantermos nas proximidades do ponto $\boldsymbol{k}_0 = \mathbf{0}$.

os elementos de matriz fora da diagonal possuem derivadas com relação a z). Dessa forma, obtemos então um Hamiltoneano independente da energia, que corresponde ao Hamiltoneano efetivo para os elétrons da banda de condução:

$$\mathcal{H} = \left(\frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + V(z) \right) \mathbb{I}_{2\times 2} + \eta(z) \begin{pmatrix} 0 & -ik_- \\ ik_+ & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

onde

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2P^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_g} \right) \quad (3.17)$$

e

$$\eta(z) = \frac{P^2}{3} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \left(\frac{V_v(z) + V(z)}{E_g^2} - \frac{V_\Delta(z) + V(z)}{(E_g + \Delta_g)^2} \right). \quad (3.18)$$

A equação (3.17) surge ao agruparmos os termos quadráticos no vetor de onda $\boldsymbol{k}$, e mostra o aparecimento da massa efetiva em semicondutores. No entanto, ignoramos em nossa dedução efeitos como acoplamento com bandas remotas, de modo que essa expressão não é suficientemente precisa para simulações posteriores. Assim, os valores das massas efetivas a serem utilizados nos cálculos apresentados nesse trabalho corresponderão a valores experimentais, e não aos valores provenientes da equação (3.17).

Notemos que se o parâmetro da interação spin-órbita no centro da zona Δ_g for nulo teremos $V_\Delta(z) = V_v(z)$, e $\eta(z)$ irá anular-se, segundo a equação (3.18). Assim, o último termo no Hamiltoneano em (3.16) deve corresponder a um tipo de interação spin-órbita.

3.2 Projeção nas sub-bandas da heteroestrutura

Para diagonalizar o Hamiltoneano efetivo em (3.16), usaremos a base de autoestados de sua parte orbital $\mathcal{H}_{orb}$, que corresponde à parte proporcional à matriz identidade:

$$\mathcal{H}_{orb} = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + V(z), \quad (3.19)$$

contando a degenerescência de spin implicitamente.

Devemos então resolver a seguinte equação de Schrödinger:

$$\mathcal{H}_{orb} f_{\nu \boldsymbol{k}_\parallel} = E_{\nu \boldsymbol{k}_\parallel} f_{\nu \boldsymbol{k}_\parallel}, \quad (3.20)$$

onde $f_{\nu \boldsymbol{k}_\parallel}$ é uma função envelope de duas componentes (para contar o grau de liberdade de spin) e $E_{\nu \boldsymbol{k}_\parallel}$ é uma autoenergia.

Segundo a seção 2.3, sabemos que

$$f_{\nu \boldsymbol{k}_\parallel}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}_\parallel \cdot \boldsymbol{r}_\parallel} \varphi_\nu(z), \tag{3.21}$$

onde $\varphi_\nu(z)$ é a componente em z da função envelope $f_{\nu \boldsymbol{k}_\parallel}(\boldsymbol{r})$.

Substituindo essa forma para a função envelope na equação (3.20), obtemos

$$E_{\nu \boldsymbol{k}_\parallel} = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m^*} + \epsilon_\nu, \tag{3.22}$$

onde ϵ_ν é a energia da ν-ésima sub-banda. Nesse trabalho, $\varphi_\nu(z)$ e ϵ_ν serão obtidos através de cálculos auto-consistentes, a serem descritos nas seções 6.1 e 6.2.

Assumindo conhecidas as funções $f_{\nu \boldsymbol{k}_\parallel}(\boldsymbol{r})$, podemos então calcular os elementos de matriz da parte correspondente à interação spin-órbita de nosso Hamiltoneano efetivo $\mathcal{H}$. Sejam os kets $\left|\nu \boldsymbol{k}_\parallel \sigma\right\rangle \equiv \left|\nu \boldsymbol{k}_\parallel\right\rangle \otimes \left|\sigma\right\rangle$ (onde $\sigma = \pm$ denota o grau de liberdade de spin), tais que $\left\langle \boldsymbol{r} | \nu \boldsymbol{k}_\parallel \sigma \right\rangle \equiv f_{\nu \boldsymbol{k}_\parallel}(\boldsymbol{r})$. Os elementos de matriz de $\mathcal{H}$ na base dos autoestados $\left|\nu \boldsymbol{k}_\parallel \sigma\right\rangle$ de $\mathcal{H}_{orb}$ são

$$\left\langle \nu' \boldsymbol{k}_\parallel \pm \right| \mathcal{H} \left| \nu \boldsymbol{k}_\parallel \pm \right\rangle = \left(\frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m^*} + \epsilon_\nu \right) \delta_{\nu\nu'}, \tag{3.23}$$

$$\left\langle \nu' \boldsymbol{k}_\parallel \pm \right| \mathcal{H} \left| \nu \boldsymbol{k}_\parallel \mp \right\rangle = \mp i \eta_{\nu\nu'} k_\mp, \tag{3.24}$$

com

$$\eta_{\nu\nu'} = \left\langle \nu' \boldsymbol{k}_\parallel \mp \right| \eta(z) \left| \nu \boldsymbol{k}_\parallel \pm \right\rangle. \tag{3.25}$$

Estamos interessados em sistemas que possuam duas sub-bandas ocupadas, ou seja, $\nu = 0, 1$. Além disso, se o terceiro autoestado do sistema estiver suficientemente distante em energia dos dois primeiros, podemos desprezar efeitos de acoplamento com as sub-bandas de energia mais alta e truncar a base de autoestados $\left|\nu \boldsymbol{k}_\parallel \sigma\right\rangle$ de $\mathcal{H}_{orb}$, utilizando apenas dois autoestados para descrever o Hamiltoneano efetivo $\mathcal{H}$. Resultados teóricos para poços duplos utilizando parâmetros realistas serão dados no capítulo 7, mostrando que essa aproximação de fato é razoável.

Com os elementos de matriz calculados anteriormente, temos então a representação matricial de $\mathcal{H}$ na base ordenada $\{\left|0\boldsymbol{k}_\parallel +\right\rangle, \left|0\boldsymbol{k}_\parallel -\right\rangle, \left|1\boldsymbol{k}_\parallel +\right\rangle, \left|1\boldsymbol{k}_\parallel -\right\rangle\}$:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \epsilon_0 + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m^*} & ik_-\alpha_0 & 0 & ik_-\eta \\ -ik_+\alpha_0 & \epsilon_0 + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m^*} & -ik_+\eta & 0 \\ 0 & ik_-\eta & \epsilon_1 + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m^*} & ik_-\alpha_1 \\ -ik_+\eta & 0 & -ik_+\alpha_1 & \epsilon_1 + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m^*} \end{pmatrix}, \tag{3.26}$$

com $\alpha_0 = \eta_{00}$, $\alpha_1 = \eta_{11}$ e $\eta = \eta_{01}$.

A diagonalização de (3.26) fornece as autoenergias:

$$\epsilon_{\lambda \boldsymbol{k}_\parallel \sigma} = \epsilon_{\boldsymbol{k}_\parallel +} + \sigma \alpha_+ \boldsymbol{k}_\parallel + \lambda \sqrt{(\eta \boldsymbol{k}_\parallel)^2 + (\epsilon_{\boldsymbol{k}_\parallel -} + \sigma \alpha_- \boldsymbol{k}_\parallel)^2} \tag{3.27}$$

com $\epsilon_{\boldsymbol{k}_\parallel \pm} = \frac{1}{2}\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}_\parallel 1} \pm \epsilon_{\boldsymbol{k}_\parallel 0}\right)$, $\epsilon_{\boldsymbol{k}_\parallel \nu} = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_\parallel^2}{2m^*} + \epsilon_\nu$, $\alpha_\pm = \frac{1}{2}(\alpha_1 \pm \alpha_0)$ e $\lambda = \pm 1$ representando o índice de sub-banda (ou pseudo-spin). Os autoestados associados podem ser encontrados nas referências [33] e [26] (a primeira possuindo cálculos mais detalhados). Cabe aqui apenas enfatizar que os autoestados desdobrados pela interação spin-órbita possuirão orientação de spin dependente de $\boldsymbol{k}_\parallel$.[2]

Os potenciais internos da heteroestrutura $V_c(z)$, $V_v(z)$ e $V_\Delta(z)$, da maneira como definimos, são todos funções pares, conforme as equações (2.31), (2.32) e (2.33). Se a heteroestrutura possuir dopagens simétricas em relação ao poço quântico, teremos $V_d(z)$ e $V_{ee}(z)$ também pares. Dessa forma, na ausência de tensões de porta e sob dopagens simétricas, o potencial total na heteroestrutra será uma função par - e, conseqüentemente, sua derivada será uma função ímpar. As funções envelope da ν-ésima sub-banda, calculadas de modo auto-consistente com esse potencial total, possuirão então necessariamente paridade definida (serão funções pares ou ímpares).

Observando que as constantes α_ν são dadas por elementos de matriz da forma $\langle \nu \boldsymbol{k}_\parallel \mp | \, \eta(z) \, | \nu \boldsymbol{k}_\parallel \pm \rangle$, e que $\eta(z)$ é dado em função das derivadas em relação a z dos potenciais (equação 3.18), podemos ver que as constantes α_ν só não serão nulas se o potencial total na heteroestrutura for espacialmente assimétrico; caso contrário, o elemento de matriz corresponderá ao produto de um função ímpar (a derivada do potencial total) e uma função par (o módulo quadrado da função envelope envolvida), totalizando uma função ímpar, que irá naturalmente gerar um resultado nulo quando integrada sobre a heteroestrutura. Dessa forma, as constantes α_ν caracterizam então um desdobramento de spin por assimetria de inversão espacial (seção 1.2), uma vez que correspondem a um tipo de interação spin-órbita gerada pela assimetria no potencial da heteroestrutura. O controle dessa assimetria, através da aplicação sistemática de campo elétricos externos, nos permite então manipular a interação spin-órbita no material, representando um ponto essencial para o desenvolvimento de dispositivos spintrônicos.

Notemos que o modelo aplicado aqui, que resulta em termos lineares em $k_\pm$, é conhecido como modelo de Rashba [10]; por isso, a interação spin-órbita aqui presente é denominada interação de Rashba ou efeito Rashba, e

[2]Podemos fazer uma analogia conceitual, e considerar o efeito Rashba como um efeito Zeeman com o campo magnético dependente de $\boldsymbol{k}_\parallel$. Para mais detalhes, ver [4] por exemplo.

as constantes α_ν são chamadas de constantes de Rashba. Cabe aqui, no entanto, enfatizar que tem sido uma prática constante chamar de efeito Rashba qualquer desdobramento de spin SIA, apesar de eles poderem ser substancialmente diferentes se usarmos Hamiltoneanos com um número maior de bandas [4].

O termo η, diferentemente dos termos α_ν, é não nulo mesmo para potenciais totais simétricos, pois seus elementos de matriz tem a forma $\langle 0\boldsymbol{k}_\parallel \mp | \, \eta(z) \, | 1\boldsymbol{k}_\parallel \pm \rangle$ (onde já assumimos apenas duas sub-bandas ocupadas), e representa um acoplamento entre as sub-bandas desdobradas pela interação de Rashba $|0\boldsymbol{k}_\parallel \pm\rangle$ e $|1\boldsymbol{k}_\parallel \mp\rangle$.

Por fim, lembramos que os materiais relevantes para esse trabalho possuem estrutura cristalina do tipo *zincblende*. Tal estrutura não possui centro de inversão espacial, e deve portanto apresentar um desdobramento de spin devido à assimetria de inversão espacial em *bulk* (seção 1.2). Esse termo é freqüentemente chamado de termo de Dresselhaus [35], e é caracterizado por um parâmetro β_ν, análogo a α_ν. Sua versão linearizada para poços quânticos é dada por [26]

$$\beta_\nu = \beta_D \frac{2m^*}{\hbar^2} \left[\epsilon_\nu - \langle \nu | V_T(z) | \nu \rangle \right], \tag{3.28}$$

onde $V_T(z)$ é o potencial total na heteroestrutura e o parâmetro β_D é uma constante específica do material em questão [36].

Se β_ν for da ordem de α_ν, os autoestados de spin do sistema serão uma mistura de autoestados da interação de Rashba e de Dresselhaus [4], e a análise desenvolvida até aqui não será mais válida (pois leva em conta apenas a interação de Rashba). Assim, em nossos sistemas, devemos ter sempre $|\beta_\nu| \ll |\alpha_\nu|$.

3.3 Análise de um dispositivo de spin baseado em tunelamento ressonante e efeito Rashba

Uma outra proposta de dispositivo de spin (além do já citado SpinFET da seção 1.3) foi descrita na referência [17]. Tal dispositivo proposto consiste de filtro de spin baseado no efeito Rashba, usando uma heteroestrutura na forma de diodo de tunelamento ressonante não-magnético de barreira tripla. Essencialmente, usa-se o efeito Rashba para criar-se teoricamente uma corrente de spin polarizada em um sistema de poço quântico duplo de $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$ com apenas uma sub-banda ocupada. Isso é feito através da aplicação de uma tensão de porta adequada para alinha-

mento dos níveis de energia desdobrados pelo efeito Rashba, gerando assim uma corrente de tunelamento polarizada devido à ressonância (ver figura 3.1).

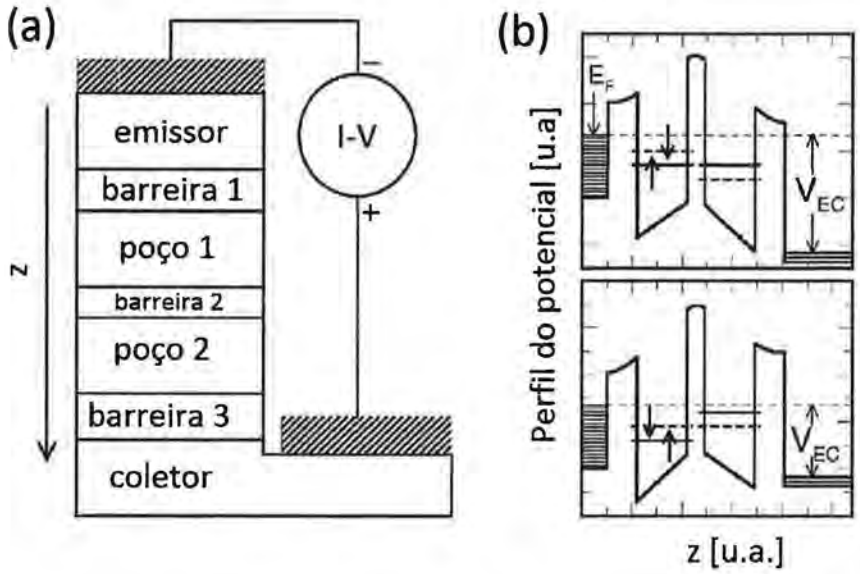

Figura 3.1: (a) Representação esquemática do dispositivo proposto em [17]. (b) Perfis dos potencias das bandas de condução (figura retirada da própria referência). Vemos o alinhamento de níveis de tunelamento ressonante dependentes de spin, através do controle da tensão entre o emissor e o coletor (V_{EC}). As flechas para cima e para baixo denotam os autoestados de spin. As regiões sombreadas representam os contatos elétricos para as medidas da corrente em função da tensão aplicada.

A hipótese básica assumida é que os gases de elétrons bidimensionais em cada um dos poços são suficientemente não interagentes, de modo que os sinais das constantes de Rashba para uma dada sub-banda são opostos para cada poço (pois a derivada do potencial total com relação a direção de crescimento tem sinal contrário em cada região). Essa não representa uma hipótese válida, conforme veremos. A rápida discussão que se segue foi retirada da referência [37], onde mais detalhes podem ser encontrados.

Consideremos uma estrutura de poço quântico duplo simétrico, com três sub-bandas ocupadas, conforme a figura (3.2). Se a barreira central é tal que podemos considerar os gases de elétrons bidimensionais nas interfaces da esquerda e da direita não interagentes, cada em deles estará sob a ação de um potencial fortemente assimétrico, e devemos esperar a presença de

efeito do Rashba. Como as derivadas desses potenciais têm sinais opostos, as constantes de Rashba α_ν devem ter sinais opostos (ver equação 3.18).

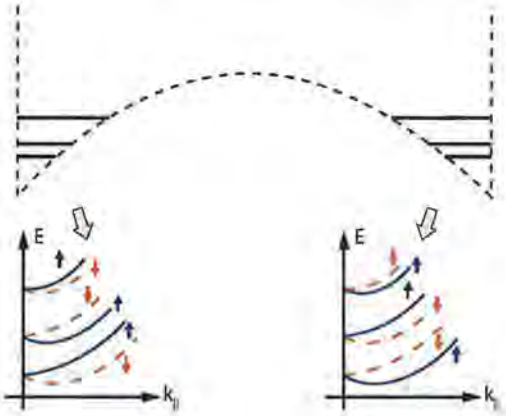

Figura 3.2: Relações de dispersão quando os 2DEG são considerados não interagentes (figura retirada da referência [37]).

Se no entanto consideramos o poço como um todo, contendo dois 2DEG, o potencial total é simétrico pela barreira central, e devemos ter α_ν nulos. Assim, temos aparentemente um paradoxo. A única maneira de trazer ambas as interpretações ao mesmo resultado é notar que as sub-bandas no primeiro caso descrito devem na verdade ser consideradas como duas sub-bandas separadas, e não como uma sub-banda desdobrada em duas pelo efeito Rashba (figura 3.3).

Dessa forma, as condições de tunelamento dependentes de spin descritas em [17] não existiriam, uma vez que as sub-bandas consideradas não corresponderiam a sub-bandas desdobradas pelo efeito Rashba. Os cálculos apresentados nessa referência levam à correntes de spin polarizadas; não obstante, eles só puderam ser obtidos devido à hipótese equivocada de que as constantes α_ν eram diferentes para cada poço. Notemos que a constante de acoplamento η não foi considerada, uma vez que essa referência supôs apenas uma sub-banda ocupada.

Enfatizamos que em nosso trabalho apenas indicamos o equívoco citado, utilizando a discussão dada em [37]. Isso é aqui elucidado pois não encontramos na literatura nenhuma conexão ou relação entre essa referência e a referência [17], que descreve o dispositivo proposto. Além disso, também não encontramos nenhuma correção ou contestação posterior relacionada à referência [17], de forma que, até então, a hipótese equivocada utilizada nessa referência era tomada como correta.

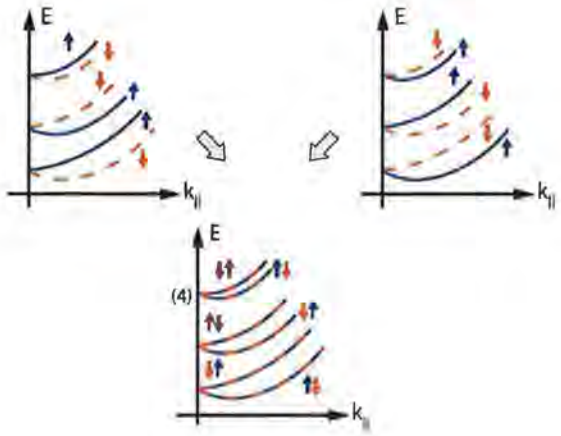

Figura 3.3: Relações de dispersão quando consideramos o poço integralmente (figura retirada da referência [37]).

Uma alternativa natural seria então tentar considerar o mesmo sistema de poço duplo, mas agora com duas sub-bandas ativas na região do canal. A corrente polarizada seria então conseguida através do tunelamento ressonante entre estados de mesmo spin mas com índice de sub-banda diferente, conforme veremos a seguir.

Com duas sub-bandas ocupadas no sistema, teríamos então os níveis de energia descritos pela equação (3.27), e a condição de ressonância entre dois níveis desdobrados pelo efeito Rashba possuindo a mesma orientação de spin seria

$$\epsilon_{\lambda=1,\boldsymbol{k}_{\parallel},\sigma=\pm} = \epsilon_{\lambda=-1,\boldsymbol{k}_{\parallel},\sigma=\pm}, \tag{3.29}$$

onde assumimos a conservação do pseudomomento no plano do 2DEG ($\boldsymbol{k}_{\parallel}$). À temperaturas baixas, essa hipótese é experimentalmente justificável (ver [38] por exemplo).

Se a tensão de porta que gera o efeito Rashba for suficientemente grande, teremos que cada função de onda do sistema estará fortemente concentrada em apenas um dos poços: o nível fundamental no poço com energia média menor, e o primeiro nível excitado no poço com energia média maior (ver figura 3.4 por exemplo). Nessa situação, uma ressonância como descrita acima geraria o tunelamento de elétrons de um poço para o outro. Além disso, devido ao efeito Rashba, essa corrente de tunelamento seria polarizada com relação ao spin, possibilitando assim o funcionamento do filtro de spin.

Para avaliar tais ressonâncias, tomemos inicialmente o caso $\sigma = +$ na

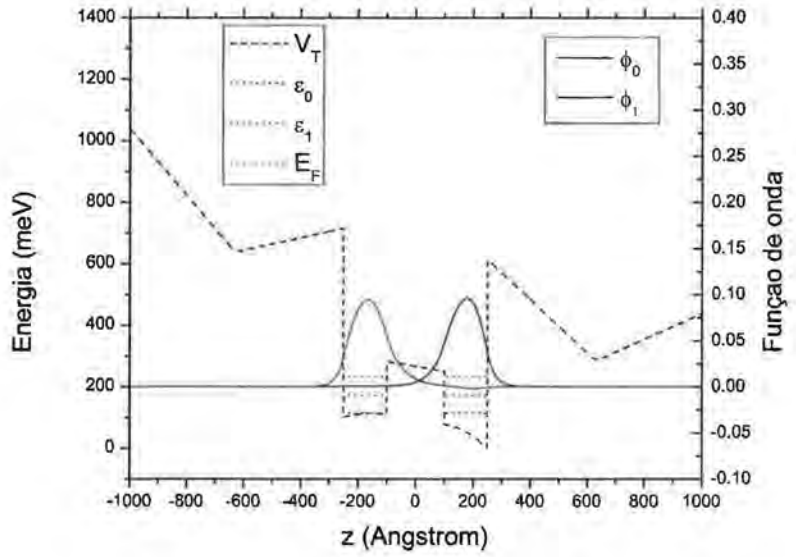

Figura 3.4: Funções de onda para um poço duplo $InSb/Al_{0.12}In_{0.88}Sb$ de 500Å sob uma tensão de porta de 0.6 Volts. Vemos que cada função de onda se concentra fortemente em apenas um dos poços. Detalhes do método de cálculo são encontrados no capítulo 6.

equação (3.29). Temos então a equação quadrática

$$\left(\eta \boldsymbol{k}_{\parallel}\right)^2 + \left(\epsilon_{\boldsymbol{k}_{\parallel}-} + \alpha_- \boldsymbol{k}_{\parallel}\right)^2 = 0, \tag{3.30}$$

onde os valores válidos de $\boldsymbol{k}_{\parallel}$ devem ser menores ou iguais que o vetor de onda de Fermi do plano do 2DEG.

Se $\eta \neq 0$, vemos facilmente equação (3.30) não possui raízes reais. Assim, a condição de ressonância (3.29) não pode ser satisfeita para nenhum $\boldsymbol{k}_{\parallel}$ real, no caso em que $\sigma = +$. O caso com $\sigma = -$ é análogo, e também leva facilmente a uma equação quadrática que não possui raízes reais. Dessa forma, considerando a conservação de $\boldsymbol{k}_{\parallel}$, vemos que é impossível obtermos ressonância de níveis desdobrados pelo efeito Rashba nesse sistema com duas sub-bandas, impossibilitando assim uma realização alternativa para o dispositivo proposto. Notemos que a eventual consideração de sistemas com um número maior de sub-bandas ocupadas requereria um novo desenvolvimento analítico e está além desse trabalho.

Capítulo 4

Gás de elétrons bidimensional com campo magnético e efeito Rashba

Este capítulo tem por objetivo descrever o acoplamento entre os autoestados de Landau e de spin e fornecer as bases teóricas para o estudo da magnetoresistência na presença do efeito Rashba.

4.1 Estados eletrônicos sob campos magnéticos perpendiculares: níveis de Landau

É sabido que a aplicação de um campo magnético suficientemente grande em um semicondutor gera níveis de energia quantizados, denominados níveis de Landau (ver [22] por exemplo). Os autoestados e autoenergias de Landau são completamente análogos àqueles do oscilador harmônico quântico unidimensional, se o campo magnético aplicado possuir componente não nula apenas em uma das direções do eixo de coordenadas adotado. O caso a ser analisado neste trabalho é o campo magnético aplicado na direção de crescimento da heteroestrutura, que assumimos ser a direção z. Esse campo magnético irá afetar o Hamiltoneano do sistema apenas nas direções x e y (como veremos a seguir), de modo que a quantização na direção de crescimento ainda poderá ser descrita pelas funções envelope obtidas da equação (2.23).

Devido à analogia com o oscilador harmônico quântico unidimensional, é conveniente descreveremos os autoestados de Landau em termos de operadores de criação e aniquilação [39]. Para $\boldsymbol{B} = (0, 0, B)$, escolhemos o gauge

$$\boldsymbol{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0) \tag{4.1}$$

para o potencial vetor $\boldsymbol{A}$.

Definimos o operador

$$\mathcal{P} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla} + e\boldsymbol{A}. \tag{4.2}$$

Naturalmente, temos $\mathcal{P} = \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$, que é o momentum *cinético* do sistema. Definimos agora os operadores de criação e aniquilação de Landau:

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2eB\hbar}}(\mathcal{P}_x + i\mathcal{P}_y), \tag{4.3}$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2eB\hbar}}(\mathcal{P}_x - i\mathcal{P}_y), \tag{4.4}$$

que obedecem às relações usuais

$$a\,|L\rangle = \sqrt{L}\,|L-1\rangle\,, \tag{4.5}$$

$$a^\dagger\,|L\rangle = \sqrt{L+1}\,|L+1\rangle\,, \tag{4.6}$$

$$a^\dagger a\,|L\rangle = L\,|L\rangle\,, \tag{4.7}$$

onde $|L\rangle$ denota um autoestado de Landau.

Com essas definições, o Hamiltoneano do sistema é dado por

$$H_{Landau} = \hbar\omega_c^*\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right), \tag{4.8}$$

sendo $\omega_c^* = \frac{eB}{m^*}$ a frequência ciclotrônica, e a carga elétrica fundamental e m^* a massa efetiva do material. As energias do sistema são

$$E_L = \hbar\omega_c^*\left(L + \frac{1}{2}\right), \tag{4.9}$$

com $L = 0, 1, 2...$ denotando o índice do autoestado de Landau.

4.2 Níveis de Landau em heteroestruturas

A escolha do gauge $\boldsymbol{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$, feito na seção anterior, nos leva à relação

$$[p_z, H_{Landau}] = 0, \tag{4.10}$$

pois $[p_z, \mathcal{P}_i] = 0$, $i = x, y, z$. Dessa forma, se a direção de crescimento de uma heteroestrutura é a direção z (como viemos assumindo até então), a aplicação do campo magnético $\boldsymbol{B} = (0, 0, B)$ não afeta os níveis de energia ϵ_ν obtidos através da equação (2.23), (onde ν é um índice de sub-banda do

sistema); assim, as componentes do movimento na direção z, no plano $x-y$, e o grau de liberdade de spin estão totalmente desacoplados, de modo que a função envelope da heteroestrutura pode ser escrita na forma fatorizada

$$f_{\nu L\sigma}(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r}|L\sigma\rangle\, \varphi_\nu(z), \tag{4.11}$$

onde $|L\sigma\rangle \equiv |L\rangle \otimes |\sigma\rangle$ e $\sigma = \pm$ é o índice de spin.

Usando a aproximação da massa efetiva, o Hamiltoneano para elétrons na heteroestrutura é dado por

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z) + V(z) + \hbar\omega_c^*\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\right]\mathbb{I}_{2\times 2} + \frac{g^*}{2}\mu_B B\sigma_z, \tag{4.12}$$

onde termos $V_c(z)$ e $V(z)$ denotam, respectivamente, o potencial estrutural da banda de condução e os potenciais externos, segundo a mesma notação da seção anterior, e $\mathbb{I}_{2\times 2}$ denota a matriz identidade bidimensional. O último termo representa a interação de Zeeman, sendo $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0}$ o magnéton de Bohr e σ_z a matriz de Pauli da direção z, na notação usual. O termo g^* denota o fator-g de Landé efetivo, que é dado pelo método $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ [40]:

$$g^* = g_0\left[1 - \frac{\left(\frac{m_0}{m^*} - 1\right)\Delta_g}{3E_g + 2\Delta_g}\right], \tag{4.13}$$

onde $g_0 \cong 2.0023$ é o fator giromagnético do spin eletrônico e m_0 é a massa do elétron em repouso. Notemos que consideramos aqui g^* constante, segundo a equação (4.13). Em sistemas bidimensionais, é sabido que g^* na verdade varia com o campo magnético B, e é fortemente alterado pelas interações de troca entre os elétrons. Para mais detalhes, recomendamos a referência [41].

Aplicando esse Hamiltoneano na função de onda de (4.11), obtemos facilmente os níveis de energia da heteroestrutura:

$$E_{\nu L\sigma} = \epsilon_\nu + \hbar\omega_c^*\left(L + \frac{1}{2}\right) + \frac{g^*}{2}\mu_B B\sigma. \tag{4.14}$$

4.3 Níveis de Landau e efeito Rashba combinados em heteroestruturas

Na presença de um campo magnético na direção de crescimento da heteroestrutura, podemos descrever o termo de Rashba em função dos operadores de criação e aniquilação $a^\dagger$ e a, através das equações (4.3) e (4.4). Dessa forma,

onde λ_1 representa um autovalor da matriz (4.18) . As raízes dessa equação são

$$\lambda_{1\pm} = \hbar\omega_c^*(N+1) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\hbar\omega_c^* - g^*\mu_B B)^2 + \frac{8eB\alpha^2}{\hbar}(N+1)}. \tag{4.20}$$

Sabemos, no entanto, que no limite em que $\alpha \to 0$, a interação spin-órbita gerada pelo efeito Rashba se anula (ver equação 3.16), e nesse caso a energia E de um autoestado arbitrário de H_{x-y} deve ser

$$\lim_{\alpha\to 0} E = \hbar\omega_c^*\left(N + \frac{1}{2}\right) + \frac{g^*}{2}\mu_B B\sigma, \tag{4.21}$$

que corresponde à energia de níveis de Landau mais interação de Zeeman ($\sigma = \pm$, novamente).

Em semicondutores do grupo III-V, tipicamente temos $m^* \sim 0.01m_0$ e $E_g \sim \Delta_g$; assim, de acordo com a equação (4.13), teremos tipicamente $g^* < 0$, de modo que podemos assumir $\hbar\omega_c^* > \frac{g^*}{2}\mu_B B$. Com isso em mente, a condição (4.21) só é satisfeita se adotarmos a raiz com sinal negativo em (4.20), que gera, no limite em que $\alpha \to 0$,

$$\lim_{\alpha\to 0} \lambda_{1-} = \hbar\omega_c^*\left(N + \frac{1}{2}\right) + \frac{g^*}{2}\mu_B B. \tag{4.22}$$

Essa energia corresponde a energia de um nível de Landau de índice N e orientação de spin positiva ($\sigma = +$), o que justifica *a posteriori* a denominação $|N+\rangle$ para o autoestado. Caso tivéssemos $\hbar\omega_c^* < \frac{g^*}{2}\mu_B B$, a raiz correta seria λ_{1+}.

Assim, a energia E_{N+} do autoestado $|N+\rangle$ é

$$E_{N+} = \hbar\omega_c^*(N+1) - \frac{1}{2}\sqrt{(\hbar\omega_c^* - g^*\mu_B B)^2 + \frac{8eB\alpha^2}{\hbar}(N+1)}. \tag{4.23}$$

O autoestado $|N+\rangle$ (já normalizado) é

$$|N+\rangle = c_{N+}\begin{pmatrix} \frac{g^*}{2}\mu_B B - \hbar\omega_c^*\left(N + \frac{3}{2}\right) + E_{N+} \\ -i\alpha\sqrt{\frac{2eB}{\hbar}(N+1)} \end{pmatrix}, \tag{4.24}$$

com

$$c_{N+} = \frac{i}{\sqrt{\left[\frac{g^*}{2}\mu_B B - \hbar\omega_c^*\left(N + \frac{3}{2}\right) + E_{N+}\right]^2 + 2\alpha^2\frac{eB}{\hbar}(N+1)}} \tag{4.25}$$

e a base ordenada $\{|L = N\rangle \otimes |+\rangle, |L = N+1\rangle \otimes |-\rangle\}$. Notemos que se $\alpha \to 0$, temos $|N+\rangle \to |L = N\rangle \otimes |+\rangle$, como esperado.

O cálculo da energia E_{N-} do autoestado $|N-\rangle$ é análogo. Primeiramente, escrevemos H_{x-y} na base ordenada $\{|L=N\rangle \otimes |-\rangle, |L=N-1\rangle \otimes |+\rangle\}$:

$$H_{x-y} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_c^*\left(N+\frac{1}{2}\right) - \frac{g^*}{2}\mu_B B & i\alpha\sqrt{\frac{2eB}{\hbar}N} \\ -i\alpha\sqrt{\frac{2eB}{\hbar}N} & \hbar\omega_c^*\left(N-\frac{1}{2}\right) + \frac{g^*}{2}\mu_B B \end{pmatrix}. \tag{4.26}$$

A equação característica da matriz (4.26) é novamente uma equação quadrática, cujas raízes são os autovalores $\lambda_{2\pm}$. Impomos então a condição de que no limite $\alpha \to 0$ a energia deverá agora corresponder àquela de um nível de Landau com orientação de spin negativa, isto é,

$$\lim_{\alpha\to 0} E_{N-} = \hbar\omega_c^*\left(N+\frac{1}{2}\right) - \frac{g^*}{2}\mu_B B. \tag{4.27}$$

Essa condição é satisfeita se escolhermos dessa vez a raiz com sinal positivo (λ_{2+}), obtendo

$$E_{N-} = \hbar\omega_c^* N + \frac{1}{2}\sqrt{(\hbar\omega_c^* - g^*\mu_B B)^2 + \frac{8eB\alpha^2}{\hbar}N}. \tag{4.28}$$

O autoestado $|N-\rangle$ (também já normalizado) é

$$|N-\rangle = c_{N-}\begin{pmatrix} -\frac{g^*}{2}\mu_B B - \hbar\omega_c^*\left(N-\frac{1}{2}\right) + E_{N-} \\ -i\alpha\sqrt{\frac{2eB}{\hbar}N} \end{pmatrix}, \tag{4.29}$$

com

$$c_{N-} = \frac{i}{\sqrt{\left[-\frac{g^*}{2}\mu_B B - \hbar\omega_c^*\left(N-\frac{1}{2}\right) + E_{N-}\right]^2 + 2\alpha^2\frac{eB}{\hbar}N}} \tag{4.30}$$

e a base ordenada $\{|L=N\rangle \otimes |-\rangle, |L=N-1\rangle \otimes |+\rangle\}$. Se $\alpha \to 0$, temos $|N-\rangle \to |L=N\rangle \otimes |-\rangle$, também como esperado.

Podemos generalizar as autoenergias de H_{x-y}, escrevendo

$$E_{N\sigma} = \hbar\omega_c^*\left(N+\frac{1}{2}+\frac{\sigma}{2}\right) - \frac{\sigma}{2}\sqrt{(\hbar\omega_c^* - g^*\mu_B B)^2 + 8\alpha^2\frac{eB}{\hbar}\left(N+\frac{1}{2}+\frac{\sigma}{2}\right)}. \tag{4.31}$$

Adicionando a energia dos níveis obtidos do Hamiltoneano na direção de crescimento z, temos então os níveis de nossa heteroestrutra:

$$\epsilon_{\nu N\sigma} = \epsilon_\nu + \hbar\omega_c^* \left(N + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2}\right) - \frac{\sigma}{2}\sqrt{(\hbar\omega_c^* - g^*\mu_B B)^2 + 8\alpha^2 \frac{eB}{\hbar}\left(N + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2}\right)}. \tag{4.32}$$

Notemos que a equação acima supõe que o termo de acoplamento η (equação 3.26) é desprezível em relação a α_ν. Além disso, também supomos que a interação de Rashba é dominante sobre a interação de Dresselhaus (isto é, $|\beta_\nu| \ll |\alpha_\nu|$). Resultados numéricos serão mostrados no capítulo 7 para justificar essas aproximações nos sistemas que estudaremos. Uma análise de sistemas bidimensionais de elétrons contendo níveis de Landau e interações de Rashba e Dresselhaus simultaneamente pode ser encontrada em [42].

4.4 Efeito Shubnikov-de Haas

Sabendo agora os níveis de energia da heteroestrutura, somos capazes de avaliar o efeito Shubnikov-de Haas na presença do efeito Rashba. No entanto, consideremos primeiramente um caso mais simples, como descrito na seção 1.4: desprezando efeitos de spin, os níveis de energia são dados por:

$$E_{\nu L} = \epsilon_\nu + \hbar\omega_c^* \left(L + \frac{1}{2}\right). \tag{4.33}$$

Teremos um pico na condutância toda vez que ocorrer o alinhamento de um nível de energia com o nível de Fermi, ou seja, toda vez que

$$\epsilon_\nu + \hbar\omega_c^* \left(L + \frac{1}{2}\right) = E_F. \tag{4.34}$$

Para gases de elétrons bidimensionais, a densidade eletrônica bidimensional da ν-ésima sub-banda é dada por

$$n_\nu = \frac{m^*}{\pi\hbar^2}\left(E_F - \epsilon_\nu\right). \tag{4.35}$$

Juntando essas duas últimas equações, e lembrando que $\omega_c^* = eB/m^*$, obtemos

$$\frac{1}{B_L} = \left(L + \frac{1}{2}\right)\frac{2e}{n_\nu h}, \tag{4.36}$$

onde B_L corresponde ao valor do campo magnético B que alinha o autoestado de número quântico L e ν-ésima sub-banda com o nível de Fermi.

Da equação (4.36) é possível verificar que as oscilações da condutância são periódicas em $1/B$, como afirmado na seção 1.4:

$$\frac{1}{B_L} - \frac{1}{B_{L-1}} = \left[\left(L + \frac{1}{2}\right) - \left(L + \frac{1}{2} - 1\right)\right] \frac{2e}{n_\nu h} = \frac{2e}{n_\nu h}. \tag{4.37}$$

Assim, vemos que o período das oscilações de Shubnikov-de Haas é $2e/n_\nu h$. Se houver a ocupação de mais de uma sub-banda, as oscilações irão se sobrepor, gerando então batimentos na condutividade. Realizando uma transformada de Fourier na medida da condutividade, somos então capazes de extrairmos o valor da densidade eletrônica n_ν, identificando experimentalmente quantas sub-bandas estão ocupadas no sistema.

4.4.1 Tensores de condutividade e resistividade

Consideremos um sistema bidimensional no plano $x - y$, com a aplicação de um campo magnético B na direção z, como viemos assumindo até aqui. A densidade de corrente $\boldsymbol{J}$ e o campo elétrico $\boldsymbol{F}$ são relacionados por $\boldsymbol{J} = \sigma \boldsymbol{F}$ na ausência de um campo magnético, onde σ é a condutividade. Se o sistema for homogêneo e isotrópico (isto é, $B = 0$), σ será um escalar. No entanto, a presença de um campo magnético dará origem ao efeito Hall, gerando um campo elétrico perpendicular à corrente, de modo que a corrente e o campo elétrico não serão mais paralelos. Nesse caso, o escalar σ deve então ser substituído por um tensor de condutividade (uma matriz bidimensional), que denotaremos por $\boldsymbol{\sigma}$. Assim, temos

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{F} \tag{4.38}$$

ou

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \end{pmatrix}. \tag{4.39}$$

Essa equação fornece a densidade que corrente que surge em resposta à aplicação de um campo elétrico; a relação inversa é dada pelo tensor de resistividade $\boldsymbol{\rho}$: $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{\rho} \boldsymbol{J}$.

Os elementos da diagonal de σ são idênticos e são funções pares pra B, enquanto os elementos fora da diagonal tem sinais opostos e são funções ímpares de B. Denotaremos o primeiro por σ_{xx} e o segundo pro σ_{xy}. Lembrando que $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\rho}^{-1}$, temos então as relações:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} \tag{4.40}$$

e

$$\boldsymbol{\rho} = \frac{1}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix}. \tag{4.41}$$

Com a aplicação do campo magnético, no equilíbrio, teremos que a força de Lorentz deverá ser balanceada pelo campo elétrico transverso (campo Hall), fornecendo então a componente não diagonal da resistividade [22]

$$\rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} = \frac{B}{en_S}, \tag{4.42}$$

onde e é a carga elétrica elementar e n_S é a densidade eletrônica bidimensional.

Para campos magnéticos que consideraremos aqui, podemos assumir que $\sigma_{xy}^2 \gg \sigma_{xx}^2$, de modo que a resistividade longitudinal é então dada por

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xx}^2} \cong \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xy}^2} = \sigma_{xx} \left(\frac{B}{en_S} \right)^2. \tag{4.43}$$

Notemos que nesse caso as componentes longitudinais da resistividade e da condutividade estão em relação *direta* - e não inversa, como acontece no caso em que o campo magnético está ausente.

A figura (4.1) mostra de maneira esquemática a medida da magnetoresistência em uma heteroestrutura genérica. O campo magnético e o campo elétrico são aplicados na direção de crescimento z (esse último responsável por gerar a assimetria no potencial da heteroestrutura para ocorrência do efeito Rashba). A resistividade ρ_{xx} é obtida através da medida da tensão V_{xx} em função da corrente elétrica I aplicada na direção x. Essa corrente é idealmente pequena, de modo que é desprezada em nossas considerações.

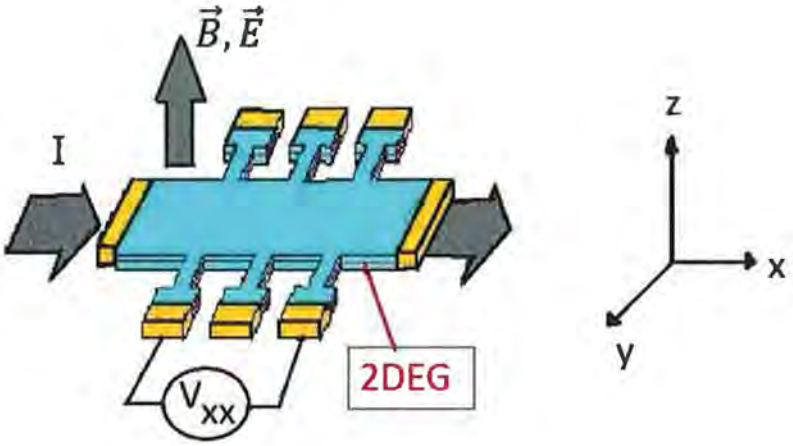

Figura 4.1: Representação esquemática da obtenção experimental de ρ_{xx} em uma heteroestrutura genérica. Uma pequena corrente elétrica I é aplicada na região do poço quântico na direção x, e a tensão V_{xx} é então medida. Da curva corrente-tensão (I-V_{xx}) obtida, podemos extrair o valor da magneto-resistência para cada campo magnético B. Sabendo então as dimensões da amostra, obtemos a resistividade longitudinal ρ_{xx}.

4.4.2 Expressão para ρ_{xx}

Considerando o problema da condução com campo magnético em um sistema bidimensional de forma mais completa, com a presença de espalhamentos por colisões e influência da temperatura, temos [43]:

$$\rho_{xx} \sim \frac{A_T}{\sinh A_T} \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c^* \tau}\right) \cos\left(2\pi \frac{E_F}{\hbar\omega_c^*} - \frac{\pi}{4}\right), \tag{4.44}$$

onde $A_T = 2\pi^2 k_B T/\hbar\omega_c^*$ e τ é o tempo quântico. Notemos que efeitos de desdobramento de spin não são levados em conta nessa expressão, e também consideramos apenas uma sub-banda ocupada. A função cosseno na expressão acima é responsável pelas oscilações na resistividade, caracterizando assim o efeito Shubnikov-de Haas.

Como visto na equação (4.31), com a presença do efeito Rashba os níveis de energia não são mais lineares em B, de modo que a peridiocidade em $1/B$ da condutividade é quebrada. Dessa forma, esperamos que a condutividade com a presença do efeito Rashba ainda apresente picos, porém não ocorrendo mais de modo harmônico.

Para incluirmos o efeito Rashba na condutividade, adotamos então o modelo proposto em [44], que considera a densidade de estados bidimensional $g^{(2D)}(E)$ como funções gaussianas centradas nos níveis de energia $\epsilon_{N\sigma}$:

$$g^{(2D)}(E) = \frac{1}{2\pi}\frac{eB}{\hbar}\sum_{N\sigma}\frac{1}{\Gamma}\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \exp\left(-2\frac{(E-\epsilon_{N\sigma})^2}{\Gamma^2}\right), \tag{4.45}$$

onde o parâmetro Γ denota o alargamento dos níveis, proveniente dos espalhamentos sofridos pelos elétrons. É sabido que Γ depende do campo magnético B [41]; não obstante, consideraremos aqui Γ constante para todos os autoestados e sob qualquer campo magnético, seguindo o modelo citado.

O nível de Fermi é determinado através da equação integral

$$n_S = \int_0^\infty g^{(2D)}(E) f(E, E_F, T) \mathrm{d}E, \tag{4.46}$$

onde n_S é a densidade eletrônica bidimensional e $f(E, E_F, T)$ é a distribuição de Fermi-Dirac.

Utilizando essa densidade de estados, a condutividade é dada por

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{\pi^2\hbar}\sum_{N\sigma}\left(N + \frac{1}{2}\right) \exp\left(-\frac{(E_F - \epsilon_{N\sigma})^2}{\Gamma^2}\right). \tag{4.47}$$

Utilizando essa equação e a equação (4.43), obtemos então uma expressão para a resistividade longitudinal ρ_{xx} que utilizaremos em nosso cálculos:

$$\rho_{xx}(B) = \frac{1}{\pi^2\hbar}\frac{B^2}{n_S^2}\sum_{N\sigma}\left(N+\frac{1}{2}\right)\exp\left(-\frac{(E_F-\epsilon_{N\sigma})^2}{\Gamma^2}\right). \tag{4.48}$$

4.5 Oscilações MIS

Como dito na seção 1.4, quando possuímos mais de uma sub-banda ocupada no sistema, surge também um efeito oscilatório adicional na resistividade - as chamadas oscilações MIS. Tais oscilações surgem quando temos o alinhamento de dois níveis de energia com índices de sub-banda diferentes. Desconsiderando efeitos de spin e tomando apenas duas sub-bandas ocupadas, as oscilações MIS são matematicamente caracterizadas pela presença de uma função cosseno adicional na expressão para a resistividade: $cos(\pi(\epsilon_1 - \epsilon_0)/\hbar\omega_c^*)$. Analisando o período dessas oscilações, somos capazes de obter experimentalmente o valor de $\epsilon_1 - \epsilon_0$. Para mais detalhes sobre as oscilações MIS, recomendamos a referência [30].

No nosso caso, no entanto, possuímos desdobramento de spin no sistema, de modo que o alinhamento só será ressonante se os níveis de energia possuírem a mesma orientação de spin. Assim, devemos esperar picos na resistividade longitudinal $\rho_{xx}(B)$ toda vez que o campo magnético B satisfizer

$$\epsilon_{0N_0+} = \epsilon_{1N_1+} \tag{4.49}$$

ou

$$\epsilon_{0N_0-} = \epsilon_{1N_1-}, \tag{4.50}$$

para quaisquer N_0 e N_1 correspondentes a autoestados ocupados.

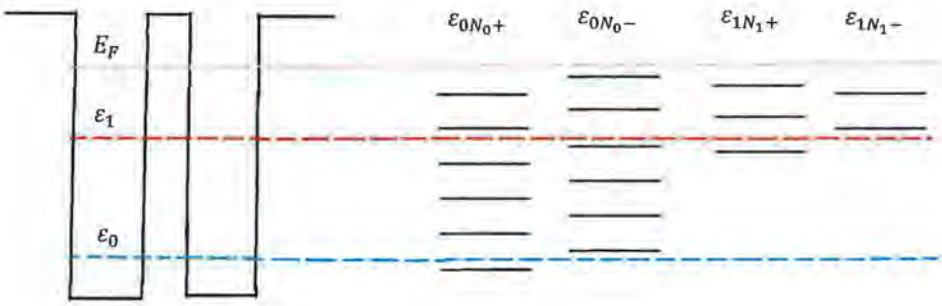

Figura 4.2: Níveis de energia $\epsilon_{\nu N\sigma}$ e nível de Fermi E_F para um poço duplo. Toda vez que ocorrer o alinhamento de dois níveis de energia de mesma orientação de spin e índices de sub-banda diferentes, teremos uma pico na resistividade longitudinal devido às oscilações MIS.

Notemos que, devido a presença do efeito Rashba, as oscilações MIS também não serão mais harmônicas, em analogia com as oscilações Shubnikov-de Haas.

Capítulo 5

Detalhamento da heteroestrutura utilizada

A heteroestrutura que estudaremos é formada pelas ligas ternárias $In_{0.52}Al_{0.48}As$ e $In_{0.53}Ga_{0.47}As$. Neste capítulo descrevemos como os parâmetros relevantes para o método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ são obtidos através dos valores estabelecidos experimental e teoricamente para os materiais binários.

5.1 Parâmetros utilizados

Para a utilização da teoria descrita nos capítulos 2 e 3, necessitamos dos valores dos parâmetros E_g (*gap* de energia no ponto $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$), Δ_g (parâmetro spin-órbita), m^* (massa efetiva), parâmetro de Kane E_p e das descontinuidades estruturais das bandas δ_i e δ_{bi}, para $i = 6, 7, 8$ (ver figura 2.5).

Nossa heteroestrutura é composta de duas ligas ternárias de semicondutores: $In_{0.52}Al_{0.48}As$ e $In_{0.53}Ga_{0.47}As$. Para ligas ternárias, seguimos o procedimento de interpolação dado na referência [28]: seja uma liga ternária de semicondutores arbitrária $A_xB_{1-x}C$. O *gap* de energia para essa liga, por exemplo, é dado por

$$E_g[A_xB_{1-x}C] = xE_g[AC] + (1-x)E_g[BC] - x(1-x)C_{E_g}[ABC], \quad (5.1)$$

onde o parâmetro C_i é chamado de parâmetro de curvamento (*bowing parameter*) da grandeza i. Assim, necessitamos dos parâmetros citados dos materiais InAs, AlAs e GaAs para descrever nossa heteroestrutura.

As medidas de magnetotransporte são realizadas à temperaturas baixas, pois, como já dito, o alargamento térmico dos níveis de energia atenua as oscilações geradas pelo efeito Shubnikov-de Haas, e compromete assim as interpretações das medidas (ver [30] por exemplo). Assim, usaremos um

valor $T = 1$ K para a temperatura em todos os nossos cálculos. Usualmente, dentre os parâmetros relevantes para nosso trabalho, apenas o *gap* de energias E_g é assumido depender de T, através da equação

$$E_g(T) = E_g(T = 0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T}, \tag{5.2}$$

onde α e β são constantes específicas do material em questão, e são conhecidos como parâmetros de Varshni [28]. Não obstante, a correção para E_g a $T = 1$ K obtida dessa equação é desprezível, de modo que usaremos o valor de E_g a $T = 0$ K para todos os materiais.

O deslocamento relativo da posição do extremo da banda de valência que acontece com a introdução das impurezas que geram as ligas ternárias é conhecido pela sigla VBO (do inglês *Valence Band Offset*), e é dado também pelo procedimento da equação (5.1). O parâmetro δ_8 representa a diferença (com relação a uma referência de energia comum) entre os valores de VBO para os materiais que compõem a heteroestrutura, ou seja, a diferença em energia dos extremos das bandas de valência [28]:

$$\delta_8 = VBO^{(b)} - VBO^{(w)}, \tag{5.3}$$

onde $VBO^{(b)}$ refere-se ao material que compõe a barreira ($In_{0.52}Al_{0.48}As$) e $VBO^{(w)}$ refere-se ao material que compõe o poço quântico ($In_{0.53}Ga_{0.47}As$).

Como estamos considerando um poço duplo, o material da barreira central será o mesmo das barreiras laterais, de modo que teremos $\delta_i = \delta_{bi}$, para $i = 6, 7, 8$. Assim sendo, sejam E_g^b o gap no material da barreira e Δ_g^b o parâmetro spin-órbita no mesmo material. De acordo com a figura (5.1), se soubermos os valores de E_g^b, E_g, δ_8 e Δ_g^b, saberemos também o valor de δ_6 e de δ_7, através de

$$\delta_6 = E_g^b - E_g - \delta_8 \tag{5.4}$$

e

$$\delta_7 = \delta_8 + \Delta_g^b - \Delta_g. \tag{5.5}$$

Assim, sabemos determinar todos os parâmetros necessários para aplicação do modelo de Kane. O único parâmetro restante relevante para nosso trabalho é a constante de Dresselhaus β_D (ver equação 3.28), que é retirado da referência [36].

A tabela (5.1) resume os parâmetros para os materiais binários relevantes, enquanto a tabela (5.2) mostra os parâmetros de curvamento para as ligas ternárias. Os valores de ambas as tabelas correspondem aos recomendados pela referência [28].

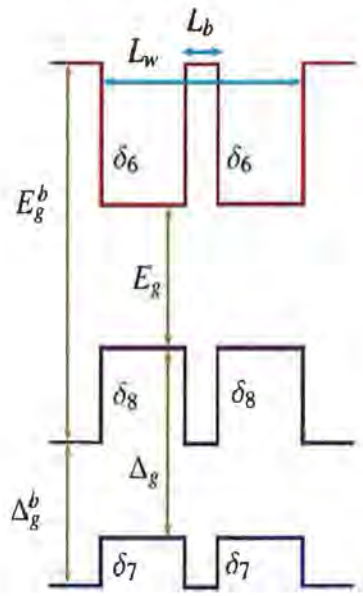

Figura 5.1: Descontinuidades nas badas da estrutura para um poço quadrado duplo

Material	InAs	GaAs	AlAs
Tipo de gap	direto	direto	indireto
E_g (eV)	0.417	1.519	3.099
Δ_g (eV)	0.39	0.341	0.28
m^*/m_0 (adim)	0.026	0.067	0.15
E_p (eV)	21.5	28.8	21.1
VBO (eV)	-0.59	-0.80	-1.33
β_D (eV·Å^3)	40.5	23.7	11.4

Tabela 5.1: Parâmetros utilizados para os materiais binários.

Utilizando os dados fornecidos nas tabelas (5.1) e (5.2) e a equação (5.1) obtemos então os parâmetros para as ligas ternárias, mostrados na tabela (5.3). O parâmetro β_D foi calculado através da média ponderada dos materiais binários pelo valor de x (ou seja, $C_{\beta_D} = 0$).

Usando então a tabela (5.3) e as equações (5.3), (5.4) e (5.5), obtemos finalmente os parâmetros de banda da heteroestrutura:

$$\delta_6 = 0.522 \text{ eV},$$

Material	$In_{1-x}Ga_xAs$	$In_{1-x}Al_xAs$
C_{E_g}	0.477	0.70
C_{Δ_g}	0.15	0.15
C_{m^*}	0.0091	0.049
C_{E_p}	-1.48	-4.81
C_{VBO}	-0.38	-0.64

Tabela 5.2: Parâmetros de curvamento para as ligas ternárias.

Material	$In_{1-x}Ga_xAs$	$In_{1-x}Al_xAs$
E_g(eV)	0.816	1.529
Δ_g (eV)	0.3296	0.2298
m^*/m_0 (adim)	0.043	0.073
E_p (eV)	25.30	22.51
VBO (eV)	-0.594	-0.786
β_D (eV·Å^3)	32.604	26.937

Tabela 5.3: Parâmetros para as ligas ternárias.

$$\delta_7 = 0.162 \text{ eV},$$

$$\delta_8 = 0.192 \text{ eV}.$$

Além disso, temos também o valor do fator-g de Landé efetivo (equação 4.13):

$$g^* \cong -1.362 g_0. \tag{5.6}$$

Notemos que o fato de $g^* < 0$ justifica *a posteriori* nossa hipótese usada na seção 4.3 para a dedução dos níveis de energia com efeito Rashba e campo magnético.

Capítulo 6

Aspectos computacionais

6.1 Formulação do problema

O potencial $V(z)$ que será considerado aqui possuirá duas contribuições: uma devido a interação dos elétrons do 2DEG, que denotaremos por $V_{ee}(z)$, e uma devido a interação do 2DEG com as impurezas ionizadas, que denotaremos por $V_d(z)$.

Na aproximação de Hartree, $V(z)$ é solução da seguinte equação de Poisson

$$\frac{d^2V}{dz^2} = -\frac{e^2}{\kappa}\left[n(z) - N_d(z)\right], \tag{6.1}$$

onde e é a carga elétrica elementar e κ é a permitividade elétrica do material que compõe o poço quântico (assumimos aqui $\kappa = 14.013\epsilon_0$, constante para toda a heteroestrutura, sendo ϵ_0 a permitividade elétrica do vácuo [26]). O termo $N_d(z)$ denota a densidade de impurezas ionizadas, e o termo $n(z)$ denota a densidade eletrônica na direção z. Lembramos aqui que $V(z)$ corresponde na verdade a uma *energia potencial* e não a um potencial de fato, como dito no início do capítulo 2. No caso da interação Coulombiana, energia potencial e potencial diferem apenas por uma constante - a carga elementar.

As heteroestruturas que nos interessam possuem a forma de poços quânticos duplos e dopagem modulada (isto é, $N_d(z)$ terá a forma de funções degrau); nessas condições, a equação de Poisson para $V_d(z)$ apenas:

$$\frac{d^2V_d}{dz^2} = \frac{e^2}{\kappa}N_d(z), \tag{6.2}$$

possui solução analítica [26]. Usaremos essa solução para descrever $V_d(z)$, uma vez que o custo computacional é diminuído. Sua forma explícita é dada na seção 6.4 juntamente com o apêndice A.

Assumimos em nossos cálculos que todas as impurezas doadoras estão ionizadas e que todos os elétrons são provenientes dessas impurezas. Assim, a densidade eletrônica total no poço deverá ser constante sob qualquer tensão de porta, e a condição de neutralidade elétrica na heteroestrutra nos leva à equação

$$-e\int n(z)\mathrm{d}\boldsymbol{r} + e\int N_d(z)\mathrm{d}\boldsymbol{r} = 0, \tag{6.8}$$

que, quando integrada sobre toda a heteroestrutura, fornece

$$\int n(z)\mathrm{d}z = \int N_d(z)\mathrm{d}z. \tag{6.9}$$

A quantidade à esquerda na equação acima também é chamada de densidade eletrônica bidimensional, que denotaremos por n_S. Usando esse resultado, juntamente com a equação (6.7), obtemos então

$$n_S = \int N_d(z)\mathrm{d}z = \frac{m^*}{\beta\pi\hbar^2}\sum_\nu \ln\left[1 + e^{\beta(E_F - \epsilon_\nu)}\right], \tag{6.10}$$

onde assumimos que as funções de onda $\varphi_\nu(z)$ estão normalizadas.

A equação (6.10) nos mostra que, conhecida a forma de $N_d(z)$ e os níveis de energia ϵ_ν, somos capazes de determinar a energia de Fermi E_F. Essa equação de fato será usada no cálculo autoconsistente, conforme veremos na seção seguinte.

6.2 Cálculo autoconsistente

Como dito na seção anterior, o potencial de Hartree $V(z)$ e as funções de onda $\varphi_\nu(z)$ estão necessariamente acoplados, de modo que precisamos calculá-los através de uma sucessão de aproximações - processo conhecido como método ou cálculo autoconsistente. O programa computacional implementado para realizar tal tarefa segue resumidamente a seguinte rotina:

1)Usa-se na primeira iteração o potencial total $V_T(z) = V_c(z)$. A equação de Schrödinger é resolvida para esse potencial, fornecendo as funções de onda $\varphi_\nu(z)$ e as energias ϵ_ν. Através da equação (6.10) é determinada a energia de Fermi E_F, e através da equação (6.7) é determinada então a densidade eletrônica $n(z)$;

2)Utilizando a forma obtida para $n(z)$, calculamos o potencial de Hartree $V(z)$;

3)Toma-se agora $V_T(z) = V_c(z)+V(z)$, e a equação de Schrödinger é então resolvida para esse potencial total na iteração seguinte. O processo cessa

quando o potencial total obtido através dos passos 1 e 2 é suficientemente próximo do potencial utilizado para realizar esses passos, de acordo com um critério de convergência arbitrário.

Após o fim do cálculo autoconsistente, obtemos as funções de onda $\varphi_\nu(z)$ e o potencial $V(z)$, possibilitando assim o cálculo das contantes de Rashba e de Dresselhaus. Os dados de entrada do programa são os parâmetros dados na seção 5.1, o perfil das dopagens $N_d(z)$, a permitividade elétrica κ e as larguras de cada região da heteroestrutura (que juntamente com as descontinuidades estruturais δ_i, $i = 6, 7, 8$, definirão $V_c(z)$).

As funções de onda $\varphi_\nu(z)$ são encontradas varrendo-se os valores de energia a partir do fundo do poço quântico e resolvendo-se a equação de Schrödinger para cada um deles, num processo conhecido como *Shooting Method* [48]. Tomamos inicialmente o valor da energia igual a do fundo do poço ($\epsilon = 0$, segundo nossa convenção), e resolvemos a equação de Schrödinger; no passo seguinte, fazemos $\epsilon \to \epsilon + d\epsilon$ (onde $d\epsilon$ é um incremento arbitrário na energia) e resolvemos a equação de Schrödinger novamente. Tal processo é repetido até que as condições de contorno apropriadas sejam aproximadamente satisfeitas; então o incremento na energia é diminuído (fazendo-se $d\epsilon \to d\epsilon/10$, por exemplo), para obtenção de uma solução mais precisa (ver figura 6.1). O processo cessa, naturalmente, quando uma precisão arbitrária é atingida. Detalhes sobre os métodos numéricos utilizados e as condições de contorno adotadas serão expostos nas seções seguintes.

O potencial total $V_T(z)$ calculado em uma iteração não é usado integralmente na iteração seguinte. Usamos um fator de amortecimento ω para garantir a convergência monotônica do cálculo autoconsistente, do modo que o potencial $V^{(j)}(z)$ usado numa nova iteração j é $V^{(j)}(z) = \omega \cdot V^{(j-1)}(z) + (1-\omega) \cdot V^{(j-2)}(z)$. Em nossos cálculos, utilizamos $\omega = 0.05$. Além disso, o critério de convergência adotado para o potencial é $|V^{(j)}(z) - V^{(j-1)}(z)| \leq 1 \cdot 10^{-4}$ meV, para todo z. A figura (6.2) ilustra o resultado do cálculo autoconsistente para um poço simples, como exemplo.

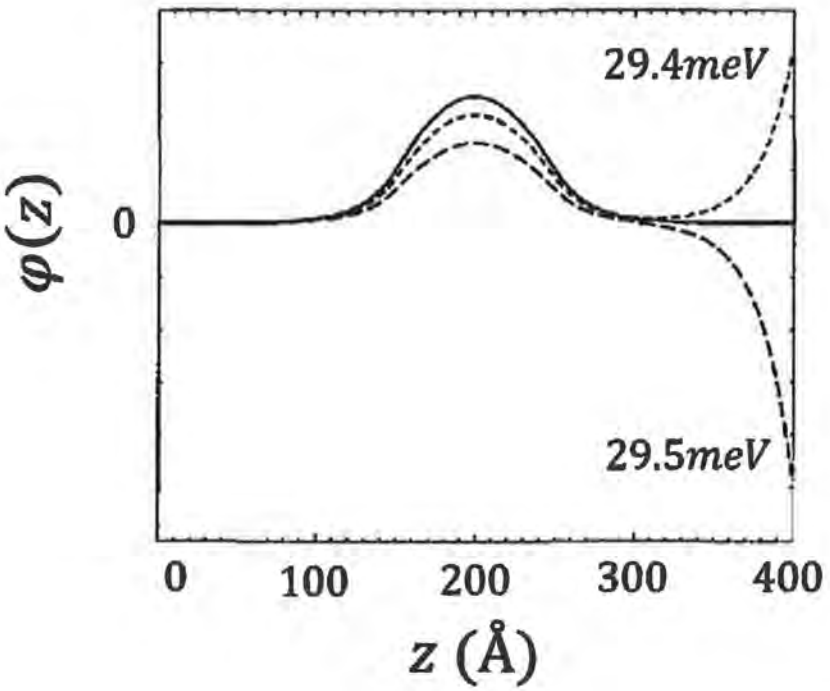

Figura 6.1: Soluções numéricas obtidas acima e abaixo da energia real $\epsilon =$ 29.43 meV para um elétron num poço simples de GaAs de largura 100 Å.

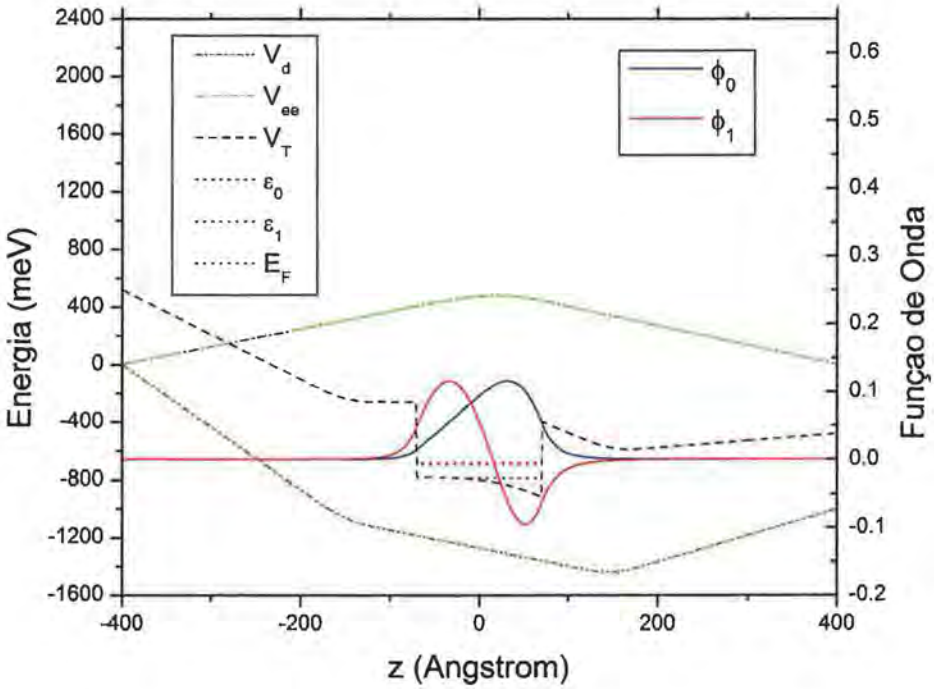

Figura 6.2: Exemplo de cálculo autoconsistente para um poço quadrado de $Al_{0.48}In_{0.52}As/Ga_{0.47}In_{0.53}As$ com 140Å de comprimento sob tensão de porta $V_g = 1$ V. Os potenciais de Hartree $V_d(z)$ e $V_{ee}(z)$ são mostrados, bem como o potencial total $V_T(z) = V_c(z) + V_{ee}(z) + V_d(z)$, os níveis de energia e as funções de onda envelope na direção z.

6.3 Métodos Numéricos

Esta seção descreve os algoritmos e métodos numéricos implementados para resolver as equações de Schrödinger (equação 6.5) e de Poisson (equação 6.3) com as condições de contorno adequadas.

6.3.1 Algoritmo de Numerov

O algoritmo de Numerov é um eficiente método para resolução de equações diferenciais de segunda ordem da forma

$$\frac{d^2y}{dx^2} = A(x) + B(x)y. \tag{6.11}$$

A característica importante da equação (6.11) para a aplicação do algoritmo de Numerov é a ausência de termo de derivada de primeira ordem e o fato de seu lado esquerdo ser linear em y. Para obtermos um esquema de diferenças finitas, usamos a equação de diferenças centrais

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} \cong 2\left(\frac{h^2}{2}\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{h^4}{4!}\frac{d^4y}{dx^4} + \mathcal{O}(h^6)\right), \tag{6.12}$$

onde $y_n = y(x_n)$ e $x_n = nh$, com h denotando a separação uniforme da variável discretizada x.

Definindo

$$F(x) = A(x) + B(x)y, \tag{6.13}$$

temos então

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + h^2F_n + \frac{h^4}{12}\left.\frac{d^2F}{dx^2}\right|_n + \mathcal{O}(h^6), \tag{6.14}$$

com $F_n = F(x_n)$, segundo a mesma notação.

Podemos substituir a segunda derivada de $F(x)$ por uma equação de diferenças similar, gerando o resultado final para o algoritmo de Numerov:

$$y_{n+1} = \frac{2y_n - y_{n-1} + \frac{h^2}{12}\left(A_{n+1} + 10F_n + F_{n-1}\right)}{\left(1 - \frac{B_{n+1}h^2}{12}\right)} + \mathcal{O}(h^6). \tag{6.15}$$

Vemos dessa equação que precisamos apenas saber o valor de y_n e y_{n-1} para calcularmos o valor seguinte y_{n+1}. Assim, vamos supor que temos as condições iniciais y_0 e sua derivada, y_0'. Para obtermos y_2 com precisão $\mathcal{O}(h^6)$,

precisamos obter primeiramente y_1 com a mesma precisão. Isso é conseguido através da relação [46]

$$y_1 = \frac{y_0\left(1-\frac{B_2h^2}{24}\right)+hy_0'\left(1-\frac{B_2h^2}{12}\right)+\frac{h^2}{24}\left(7F_0+6A_1-A_0\right)-\frac{h^4B_2}{36}\left(F_0+2A_1\right)}{1-\frac{B_1h^2}{4}+\frac{B_1B_2h^4}{18}}. \tag{6.16}$$

A eficiência do algoritmo de Numerov está no fato de que um erro local da ordem de h^6 é obtido com apenas um cálculo de $A(x)$ e $B(x)$ por passo. Isso pode ser comparado por exemplo com o método de Runge-Kutta, que requer o cálculo de seis valores de funções por passo para obtenção de um erro local de ordem de h^6. Uma descrição mais detalhada do algoritmo de Numerov pode ser encontrada em [47].

6.3.2 Equação de Schrödinger Unidimensional

Como dito na seção 6.1, devemos calcular numericamente a componente em z da função envelope $\varphi_\nu(z)$ e o nível de energia ϵ_ν. Isso é feito resolvendo-se a equação de Schrödinger para $\varphi_\nu(z)$:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+V_c(z)+V(z)\right]\varphi_\nu(z)=\epsilon_\nu\varphi_\nu(z). \tag{6.17}$$

Relacionando essa equação de Schrödinger com a equação (6.11), temos as correspondências

$$y(x) \to \varphi(z), \tag{6.18}$$

$$A(z) \to 0 \tag{6.19}$$

e

$$B(z) \to \frac{2m^*}{\hbar^2}\left[\epsilon_\nu - V_c(z) - V(z)\right], \tag{6.20}$$

de modo que o algoritmo de Numerov em questão (equação 6.15) é

$$\varphi_{n+1} = \frac{2\varphi_n - \varphi_{n-1} + \frac{h^2}{12}\left(10B_n\varphi_n - B_{n-1}\varphi_{n-1}\right)}{\left(1-\frac{B_{n+1}h^2}{12}\right)}, \tag{6.21}$$

com $\varphi_n = \varphi(z = nh)$ e $B_n = B(z = nh)$. Notemos que aqui o índice n em φ_n refere-se à discretização do algoritmo de Numerov, e não ao número quântico associado a n-ésima sub-banda.

Além dessa equação, necessitamos também das condições de contorno para resolver o problema numérico de maneira completa. Sabemos que em

regiões infinitamente longe do poço quântico φ deve anular-se; numericamente, no entanto, devemos definir um comprimento L, maior que largura do poço L_w, que seja suficientemente grande para que essa condição de contorno seja coerente. Assim,

$$\varphi\left(z = \pm\frac{L}{2}\right) = 0. \tag{6.22}$$

Usualmente, valores $L \geq 2L_w$ são suficientes para a convergência do cálculo. Para uma discussão mais detalhada, ver [48].

Ao invés de usarmos a equação (6.16) para determinar φ_1, podemos fazer uma simplificação: sabemos que que se $\varphi_{n=0} = \varphi(z = -L/2) = 0$, o valor de $\varphi_{n=1} = \varphi(z = -L/2 + h)$ deve ser maior que zero e finito. Assim, de maneira geral, podemos tomar simplesmente

$$\varphi\left(z = -\frac{L}{2} + h\right) = 1, \tag{6.23}$$

pois φ será normalizada ao fim do cálculo. Essa escolha é justificada pelo fato de a equação de Schrödinger ser uma equação de autovalores: se multiplicarmos um autoestado (φ_ν) por uma constante (a constante de normalização), o resultado ainda será um autoestado, e com o mesmo autovalor associado (ϵ_ν).

Assumiremos também $\varphi_\nu(z)$ e sua derivada contínuas nas interfaces dos diferentes materiais que compõem a heteroestrutura. A Aproximação da Função Envelope (seção 2.3) justifica a continuidade de $\varphi_\nu(z)$; não obstante, a continuidade de sua derivada nas interfaces implica em estarmos considerando a massa efetiva dos diferentes materiais como aproximadamente idêntica [22]. Tipicamente, essa aproximação é razoável se a penetração da função de onda na barreira for pequena. Além disso, também ignoramos aqui os efeitos da interação spin-órbita nas condições de contorno. Essa aproximação, por sua vez, é razoável para sistemas com dopagens não muito altas ($n_S < 10^{12}$ cm^{-2}) e *gap* de energia não muito estreito. Uma discussão sobre a influência dessas duas aproximações pode ser encontrada em [49].

Para sistemas com poços quânticos largos ($L_w \gtrsim 500$Å) e/ou potenciais que variem rapidamente, as 15 casas decimais significativas que usualmente os compiladores atribuem às variáveis do tipo *float* podem não ser suficientes para a convergência dos cálculos das funções de onda, devido ao acúmulo de erros de arredondamento [48]. Para evitar tal problema, utilizamos a biblioteca computacional GMP (*GNU Multiple Precision*) para resolver numericamente a equação de Schrödinger [50]. Essa biblioteca possibilita a realização de cálculos com precisão arbitrária, eliminando assim o problema referente ao acúmulo de erros de arredondamento.

Utilizamos nos cálculos que serão apresentados nesse trabalho 100 casas decimais significativas, para garantir a convergência dos cálculos das funções de onda. Enfatizamos que apenas a equação de Schrödinger foi resolvida com o uso da GMP; todos os demais cálculos do ciclo autoconsistente foram realizados com a precisão padrão do compilador.

6.3.3 Equação de Poisson para $V_{ee}(z)$

O método de Numerov pode também ser aplicado a equação de Poisson unidimensional que fornece $V_{ee}(z)$ (equação 6.3). Assim, seguindo a notação da equação (6.11), temos as correspondências:

$$y(x) \to V_{ee}(z), \tag{6.24}$$

$$A(z) \to -\frac{e^2}{\kappa} n(z), \tag{6.25}$$

$$B(z) \to 0. \tag{6.26}$$

Usando então a equação (6.15), temos o algoritmo de Numerov para a equação de Poisson:

$$V_{n+1} = 2V_n - V_{n-1} + \frac{h^2}{12}\left(A_{n+1} + 10A_n + A_{n-1}\right), \tag{6.27}$$

onde $V_n = V_{ee}(z = nh)$ e $A_n = A(z = nh)$.

As condições de contorno da equação de Poisson para $V(z)$ devem satisfazer a aplicação de tensões de portas através de contatos externos na heteroestrutura. Seja V_g a diferença de potencial elétrica aplicada dessa forma. Devemos então ter

$$V\left(z = -\frac{L}{2}\right) = 0, \;\; V\left(z = \frac{L}{2}\right) = V_g, \tag{6.28}$$

onde L denota a largura total da heteroestrutra que tomaremos em nossos cálculos. Notemos que amostras reais são muito mais largas que apenas a região próxima ao poço quântico que consideramos aqui; assim, as tensões de porta aqui utilizadas não correspondem a tensões de porta reais aplicadas em sistemas experimentais, e simulam apenas qualitativamente a presença de um campo elétrico na heteroestrutura.

A expressão analítica para $V_d(z)$ já inclui essa condição de contorno; dessa forma, o potencial V_{ee} deve satisfazer às condições

$$V\left(z = -\frac{L}{2}\right) = 0, \;\; V\left(z = \frac{L}{2}\right) = 0, \tag{6.29}$$

pois nessas regiões as funções de onda (e conseqüentemente as densidades $n(z)$) devem também anular-se.

O método de Numerov requer, no entanto, a especificação do valor de V_{ee} em $z = -L/2+h$, que denotaremos por V_1. De acordo com a equação (6.16), isso é equivalente a fornecer V_0', que corresponde ao valor da derivada de V_{ee} em $z = -L/2$. Assim, temos então um problema padrão de encontrar a raiz de uma equação: devemos encontrar o valor de V_0' que zera V_{ee} no outro extremo do intervalo de integração, $z = L/2$. Isso é facilmente resolvido usando o método da bisseção [51] para encontrar raízes de funções reais: basta fornecemos um intervalo inicial de valores para V_0' que contenha certamente a raiz da equação. Como esse valor procurado não deve ser muito grande (pois esperamos que o potencial varie lentamente em regiões distantes do poço quântico), um intervalo numérico inicial de -1×10^6 a 1×10^6 é certamente suficiente para a convergência do método da bisseção em nossos sistemas.

6.4 Solução analítica da equação de Poisson para $V_d(z)$

A equação de Poisson para o potencial proveniente das dopagens apenas (equação 6.2) é dada por

$$\frac{d^2V_d}{dz^2} = \frac{e^2}{\kappa}N_d(z), \tag{6.30}$$

onde e é a carga elementar e κ é a permitividade elétrica do material.

Consideraremos heteroestruturas com dopagem modulada. Nessas condições $N_d(z)$ terá a forma de funções degrau, a ser:

$$N_d(z) = \begin{cases} 0, & \text{se } -L \leq z \leq -L_d \\ N_a, & \text{se } -L_d \leq z \leq -L_d + w \\ 0, & \text{se } -L_d + w \leq z \leq L_d - w \\ N_b, & \text{se } L_d - w \leq z \leq L_d \\ 0, & \text{se } L_d \leq z \leq L \end{cases} \tag{6.31}$$

onde w representa a largura das regiões de dopagem (ver figura 6.3).

A equação de Poisson que devemos resolver é então

$$\frac{d^2V_d}{dz^2} = \begin{cases} 0, & \text{se } -L \leq z \leq -L_d \\ \frac{e^2}{\kappa}N_a, & \text{se } -L_d \leq z \leq -L_d + w \\ 0, & \text{se } -L_d + w \leq z \leq L_d - w \\ \frac{e^2}{\kappa}N_b, & \text{se } L_d - w \leq z \leq L_d \\ 0, & \text{se } L_d \leq z \leq L \end{cases} \tag{6.32}$$

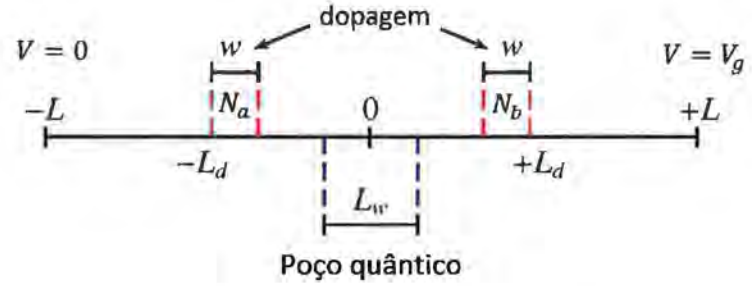

Figura 6.3: Representação esquemática da dopagem modulada na heteroestrutura. A largura de ambas as regiões de dopagem é assumida idêntica, com valor w (as densidades de dopagens N_a e N_b podem, no entanto, serem diferentes). A tensão de porta aplicada (V_g) também é ilustrada.

Adotamos as condições de contorno $V_d(z=-L)=0$ e $V_d(z=L)=-eV_g$, que simulam a aplicação de uma tensão de porta V_g através da heteroestrutura (lembrando que $V_d(z)$ corresponde na verdade a uma *energia potencial*, como já dito). Sabendo que $V_d(z)$ e sua derivada devem ser contínuas através da heteroestruturas, obtemos então

$$V_d(z) = \begin{cases} c_1 z + c_2, & \text{se } -L \leq z \leq -L_d \\ \frac{e^2}{2\kappa} N_a z^2 + c_3 z + c_4, & \text{se } -L_d \leq z \leq -L_d + w \\ c_5 z + c_6, & \text{se } -L_d + w \leq z \leq L_d - w \\ \frac{e^2}{2\kappa} N_b z^2 + c_7 z + c_8, & \text{se } L_d - w \leq z \leq L_d \\ c_9 z + c_{10}, & \text{se } L_d \leq z \leq L \end{cases} \tag{6.33}$$

Os coeficientes c_i são dados explicitamente no apêndice A.

6.5 Cálculo da resistividade longitudinal $\rho_{xx}(B)$

Como dito na seção 4.4.2, devemos resolver as seguintes equações acopladas:

$$g^{(2D)}(E) = \frac{1}{2\pi}\frac{eB}{\hbar}\sum_{N\sigma}\frac{1}{\Gamma}\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\exp\left(-2\frac{(E-\epsilon_{N\sigma})^2}{\Gamma^2}\right) \tag{6.34}$$

e

$$n_S = \int_0^\infty g^{(2D)}(E) f(E, E_F, T) \mathrm{d}E. \tag{6.35}$$

Como conhecemos n_S, devemos então encontrar o nível de Fermi E_F que satisfaça ambas as equações simultaneamente. No entanto, já possuímos um

nível de Fermi, proveniente do cálculo autoconsistente (seções 6.1 e 6.2), e utilizado para calcular as constantes de Rashba; porém, esse valor de E_F foi obtido considerando elétrons livres no plano $x-y$. Para uma correta análise das oscilações da resistividade, é necessário conhecermos a variação do nível de Fermi em função do campo magnético B; assim, denotaremos o nível de Fermi aqui calculado por $E_F^{(2D)}$. Naturalmente, o sistema completo (isto é, considerando as três direções) possui um único nível de Fermi. Não obstante, a simplificação feita na seção 6.1 ao usarmos as funções envelope para elétrons livres no plano $x-y$ requer que façamos essa distinção *ad-hoc*, pois desconsideramos a presença do campo magnético no cálculo autoconsistente.

Como a temperatura T e a densidade eletrônica bidimensional n_S são fixos, para a obtenção de $E_F^{(2D)}$ devemos então encontrar a raiz da equação

$$\int_0^\infty g^{(2D)}(E) f(E, E_F^{(2D)}) \mathrm{d}E - n_S = 0, \tag{6.36}$$

onde $g^{(2D)}(E)$ é dada pela equação (6.34), fazendo a correspondência $E_F \to E_F^{(2D)}$.

Assim, utilizamos um procedimento análogo ao do cálculo autoconsistente: introduzimos inicialmente $E_F^{(2D)} = 0$ e calculamos o valor de (6.36); o valor de $E_F^{(2D)}$ é então incrementado arbitrariamente, e (6.36) é calculada novamente. Esse processo continua até o valor de (6.36) mude de sinal. Nesse caso, sabemos que ultrapassamos a raiz procurada, de modo que o incremento de $E_F^{(2D)}$ é diminuído. O procedimento termina assim que o incremento for arbitrariamente pequeno, ou que a raiz tenha sido obtida com a precisão numérica desejada. Naturalmente, $E_F^{(2D)}$ será função de B. Assim, incrementamos também arbitrariamente B, e retornamos à rotina de cálculo descrita para determinação de $E_F^{(2D)}$. A figura (6.4) ilustra genericamente a variação de $E_F^{(2D)}$ em função de B considerando apenas níveis de Landau (isto é, ignorando os efeitos Rashba e Zeeman).

Uma vez conhecido $E_F^{(2D)}(B)$ para o intervalo de B desejado, obtemos então a resistividade longitudinal $\rho_{xx}(B)$ através da equação (4.48):

$$\rho_{xx}(B) = \frac{1}{\pi^2 \hbar} \frac{B^2}{n_S^2} \sum_{N\sigma} \left(N + \frac{1}{2} \right) \exp\left(-\frac{(E_F^{(2D)}(B) - \epsilon_{N\sigma})^2}{\Gamma^2} \right). \tag{6.37}$$

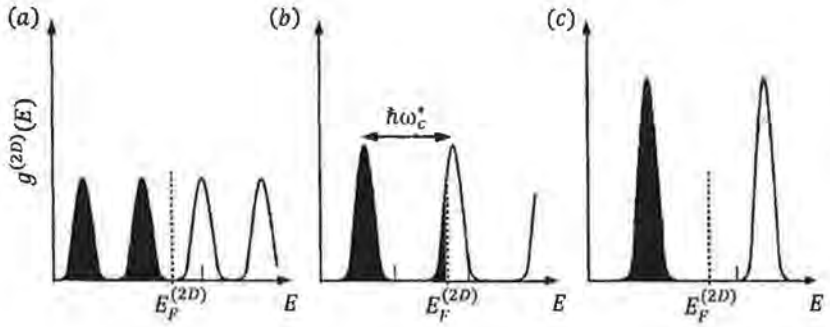

Figura 6.4: Densidade de estados $g^{(2D)}(E)$ (equação 6.34). As regiões sombreadas denotam os autoestados ocupados. O campo magnético B é aumentado de (a) para (c), e podemos ver que $E_F^{(2D)}$ se desloca para manter a densidade eletrônica constante. Efeitos de desdobramento de spin não são mostrados.

Capítulo 7

Resultados e Discussões

Na dedução dos níveis de energia da heteroestrutura com a presença de campo magnético e efeito Rashba (seção 4.3), consideramos que $|\eta| \ll \|\alpha_\nu|$ e $|\beta_\nu| \ll |\alpha_\nu|$. Assim, devemos encontrar valores realistas para o perfil de dopagens $N_d(z)$ e para as larguras do poço quântico L_w e da barreira L_b (ver figura 2.5) que satisfaçam essas condições. De acordo com a referência [33], os valores de η decrescem (em módulo) com o aumento da densidade eletrônica no poço e da largura da barreira. Seguindo a notação da equação (6.31), o perfil de dopagens $N_d(z)$ que usamos é dado pelos seguintes parâmetros:

$$w = 40 \text{ Å},$$
$$L_d = 220 \text{ Å},$$
$$N_a = N_b = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}.$$

Esse perfil corresponde a uma densidade eletrônica bidimensional $n_s = 20 \cdot 10^{11}$ cm^{-2}, que representa uma densidade experimentalmente realista (ver [24] por exemplo).

Além disso, usamos as larguras $L_w = 300$ Å e $L_b = 40$ Å. As figuras (7.1) e (7.2) mostram as funções envelope na direção z, níveis de energia e a forma do potencial autoconsistente para as tensões de porta $V_g = 0$ V e $V_g = 0.3$ V.

Com esses valores, obtemos através do cálculo autoconsistente α_ν, η e β_ν, conforme a figura (7.3).

Vemos primeiramente que as constantes de Dresselhaus $|\beta_\nu|$ permanecem desprezíveis em relação a $|\alpha_\nu|$ sob todas as tensões de porta simuladas, possuindo valores da ordem de 0.1 meV·Å. Já os valores de $|\eta|$ tornam-se aproximadamente 1 meV·Å para tensões de porta maiores que 0.2 V (em módulo), enquanto os valores de $|\alpha_\nu|$ são aproximadamente 20 meV·Å. Assim, conseguimos satisfazer razoavelmente as duas condições citadas com a escolha de parâmetros mostrada.

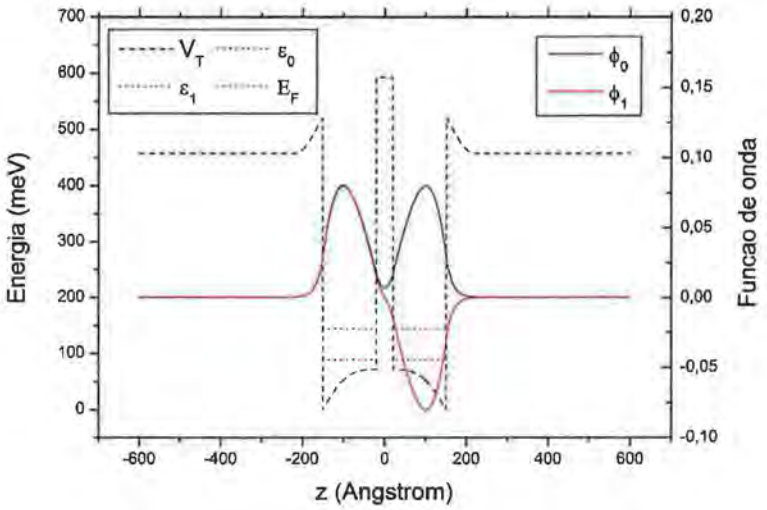

Figura 7.1: Funções de onda envelope na direção z, níveis de energia e potencial total para $V_g = 0$ V. Notemos que $\epsilon_1 - \epsilon_0 \cong 0.5$ meV, e por isso sua diferença não é visível na escala adotada para as energias.

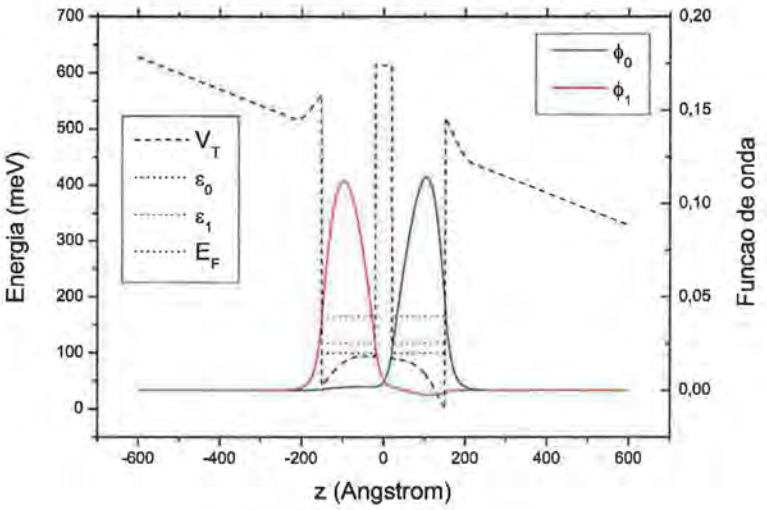

Figura 7.2: Funções de onda envelope na direção z, níveis de energia e potencial total para $V_g = 0.3$ V. Vemos que as funções de onda se concentram fortemente em um dos poços, devido à assimetria no potencial total.

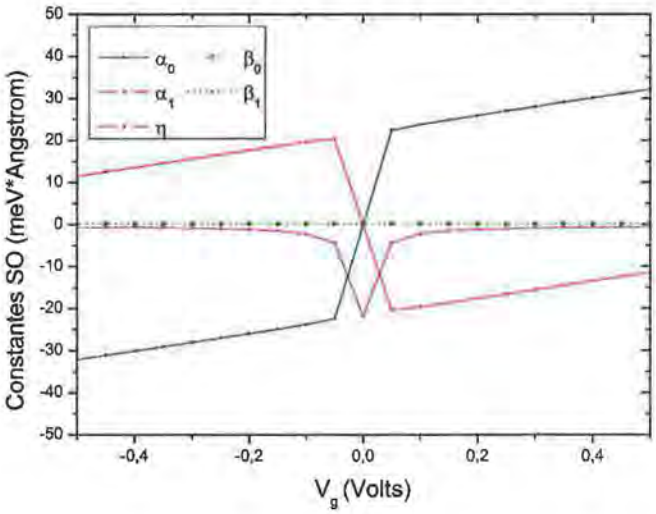

Figura 7.3: Constantes de acoplamento spin-órbita em função da tensão de porta obtidas através do cálculo autoconsistente.

Naturalmente, devemos ter apenas duas sub-bandas ocupadas sob todo o intervalo de tensões de porta considerado. A figura (7.4) mostra os níveis de energia ϵ_ν para três primeiras sub-bandas, bem como a energia de Fermi E_F, em função da tensão de porta. Vemos que de fato apenas duas sub-bandas são ocupadas, e também que ϵ_2 está relativamente distante em energia dos níveis ϵ_0 e ϵ_1, justificando a aproximação feita na seção 3.2.

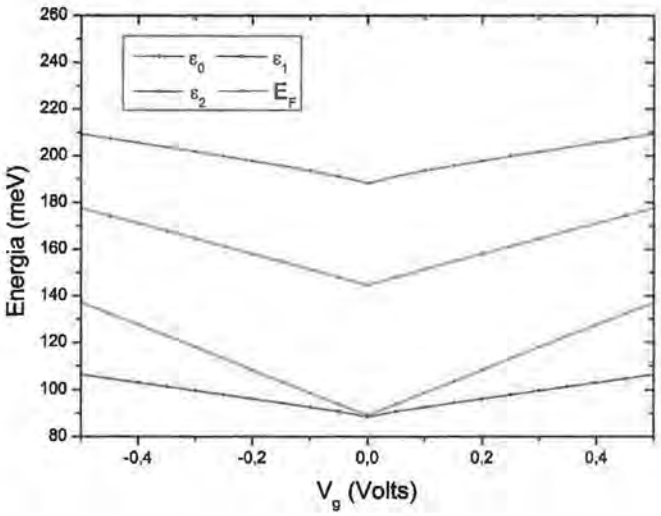

Figura 7.4: Níveis de energia em função da tensão de porta. Vemos que possuímos apenas duas sub-bandas ocupadas sob todo o intervalo de tensões considerado. Além disso, o nível de energia ϵ_2 permanece relativamente distantes dos níveis ϵ_0 e ϵ_1.

7.1 Níveis de energia com campo magnético

Escolhendo $V_g = 0.3$ V, temos então $\alpha_0 \cong 28.05$ meV·Å e $\alpha_1 \cong -15.63$ meV·Å. Utilizando esses valores para as constantes de Rashba, calculamos os níveis de energia segundo a equação (4.32). Um exemplo utilizando $B = 1.5$ T é mostrado na figura (7.5).

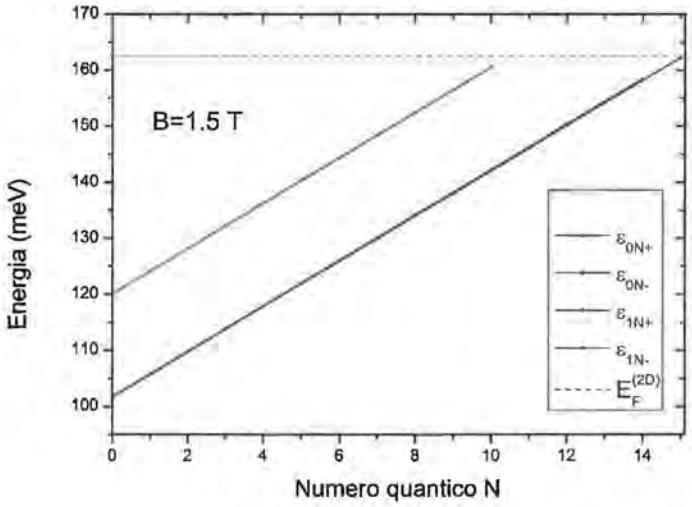

Figura 7.5: Níveis de energia $\epsilon_{\nu N\sigma}$ e nível de Fermi $E_F^{(2D)}$ para $B = 1.5$ T. Vemos que a energia cresce com o número quântico L de modo quase-linear. O desdobramento de spin existente não é claramente visível na escala utilizada, devido ao pequeno valor de α_ν. Notemos que as linhas do gráfico meramente conectam os pontos, uma vez que os níveis de energia são, naturalmente, discretos.

Vemos que os níveis de energia crescem de modo quase-linear com o número quântico N. O desdobramento de spin para cada sub-banda é relativamente pequeno (da ordem de 0.1 meV); porém, ele aumenta de modo também quase-linear (como podemos ver na figura 7.6).

A figura (7.7) mostra os níveis de energia em função de B para os 5 primeiros autoestados ocupados de cada sub-banda desdobrada (isto é, $N = 0, 1, 2, 3, 4$). A não linearidade dos níveis de energia com o campo magnético devido à presença do efeito Rashba não é evidente, devido ao pequeno valor relativo das constantes α_0 e α_1.

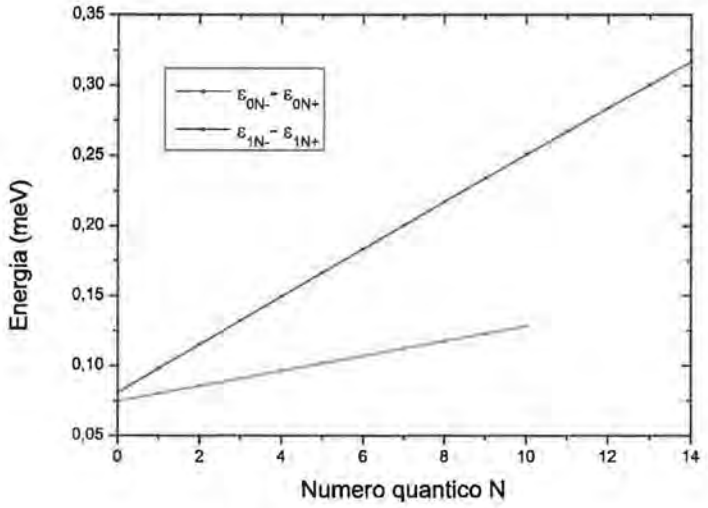

Figura 7.6: Desdobramento de spin para cada sub-banda sob $B = 1.5$ T. Observamos o aumento do desdobramento em função do número quântico N.

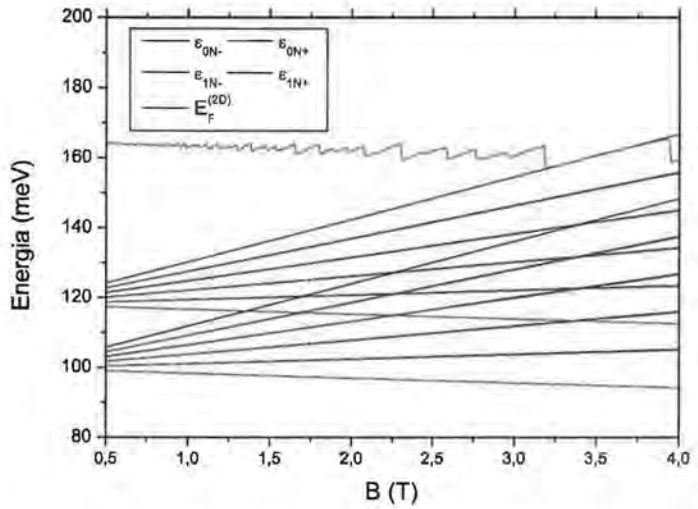

Figura 7.7: Níveis de energia em função de B para os cinco primeiros autoestados ocupados das quatro bandas consideradas. O desdobramento de spin não é claro na escala adotada devido ao pequeno valor das constantes de Rashba (exceto para $N = 0$).

7.2 Resistividade longitudinal

Mantidas as constantes de Rashba escolhidas na seção anterior, analisamos então o comportamento de $\rho_{xx}(B)$ para dois valores diferentes para o alargamento dos níveis: $\Gamma = 1.5$ meV e $\Gamma = 0.4$ meV.

7.2.1 Caso $\Gamma = 1.5$ meV

Utilizando um valor $\Gamma = 1.5$ meV para o alargamento dos níveis, temos as figuras (7.8) e (7.9) mostrando os resultados obtidos para $\rho_{xx}(B)$ e $E_F^{(2D)}(B)$ respectivamente. Notemos que valores similares para Γ foram usados nas referências [24] e [44].

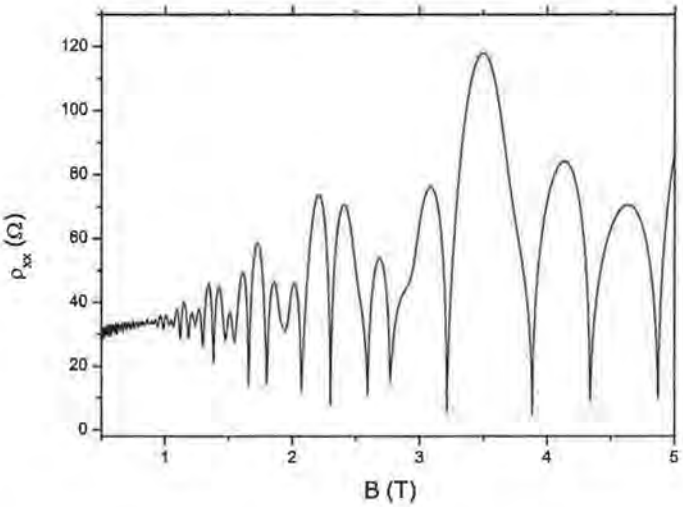

Figura 7.8: Resistividade longitudinal ρ_{xx} em função do campo magnético para $\Gamma = 1.5$ meV. Não observamos mais estruturas de batimentos, devido à presença dos desdobramentos de spin. Além disso, não observamos oscilações claras sob campos pequenos.

Primeiramente, observamos que sob campos magnéticos baixos (aproximadamente entre 0.5 T e 1.0 T) ρ_{xx} não apresenta picos notáveis. Isso deve-se ao fato de nessa região os autoestados estarem muito próximos em energia, gerando uma densidade de estados contínua devido ao alargamento Γ; dessa forma, o comportamento assemelha-se ao de um material metálico. Para campos mais altos, a diferença de energia dos níveis passa a ser maior que Γ, e temos então o aparecimento de picos em ρ_{xx}, como esperado para uma

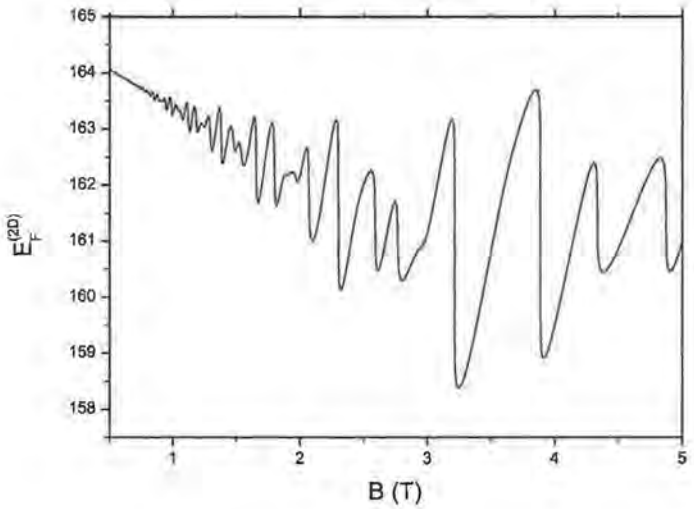

Figura 7.9: Variação do nível de Fermi $E_F^{(2D)}$ em função do campo magnético para $\Gamma = 1.5$ meV.

densidade de estados discreta. Podemos claramente notar que as oscilações não são mais periódicas, pois não existem estruturas de batimentos. Isso é também de fato esperado, devido à presença dos desdobramentos de spin (como dito na seção 4.4.2).

Para avaliar qual o desdobramento de spin é mais relevante, tomamos momentaneamente $g^* = 0$. A figura (7.10) mostra que $\rho_{xx}(B)$ não é significativamente alterada. Tal fato pode ser justificado se notarmos que o valor $g^* \cong -1.362 g_0$ leva a uma energia de Zeeman $(g^*/2)\mu_B B \cong 0.058 \cdot B$ (meV), que permanece menor que o alargamento dos níveis $\Gamma = 1.5$ meV utilizado para todo o intervalo de B considerado. Sabemos que os níveis de energia na verdade não dependem da interação de Zeeman de maneira linear (ver equação 4.32); no entanto, a justificativa dada serve como estimativa inicial. Além disso, notemos que a interação de Zeeman deve se tornar mais relevante no comportamento de ρ_{xx} conforme aumentamos o campo magnético. Isso é de fato observado na figura (7.10), onde notamos que ρ_{xx} torna-se levemente diferente para os dois valores de g^* considerados a partir de campos magnéticos maiores que 3 T.

Fazendo agora $\alpha_0 = \alpha_1 = 0$, obtemos a figura (7.11). Vemos novamente que o comportamento de ρ_{xx} é praticamente inalterado. Isso nos mostra que o desdobramento de spin devido ao efeito Rashba deve ser menor que o alargamento $\Gamma = 1.5$ meV para o intervalo de campos magnéticos considerados,

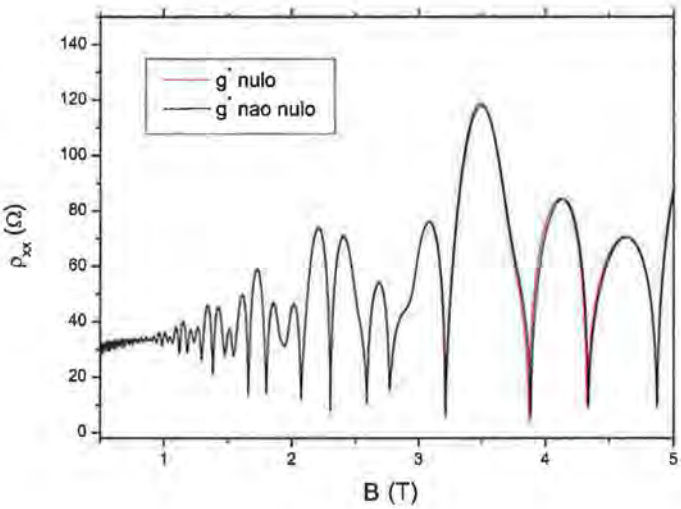

Figura 7.10: Comparação da resistividade longitudinal calculada quando consideramos artificialmente $g^* = 0$. Vemos que a resistividade praticamente não é alterada, de modo que desdobramento de spin gerado pelo efeito Zeeman não é expressivo em nosso sistema para os campos magnéticos considerados.

de maneira análoga ao caso anterior, com $g^* = 0$. Notemos que a figura (7.6) nos mostra que os desdobramentos de spin devido ao efeito Rashba são da ordem de 0.1 meV para $B = 1.5$ T, em concordância com o resultado obtido. Assim, utilizando $\Gamma = 1.5$ meV, não somos capazes de identificar qual dos desdobramentos de spin é mais relevante em nosso sistema.

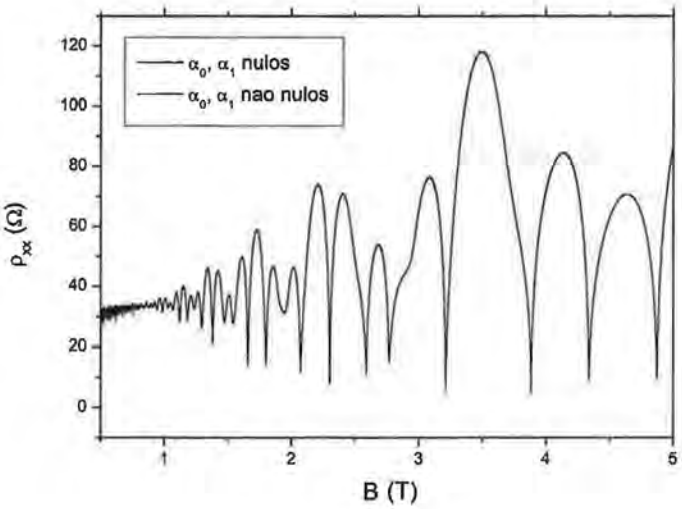

Figura 7.11: Resistividade longitudinal $\rho_{xx}(B)$ quando consideramos artificialmente $\alpha_0 = \alpha_1 = 0$. Vemos que a resistividade é levemente alterada, e apenas sob B pequenos.

7.2.2 Caso $\Gamma = 0.4$ meV

Utilizando agora o valor $\Gamma = 0.4$ meV para o alargamento dos níveis, temos as figuras (7.12) e (7.13) mostrando os resultados obtidos para $\rho_{xx}(B)$ e $E_F^{(2D)}(B)$ respectivamente.

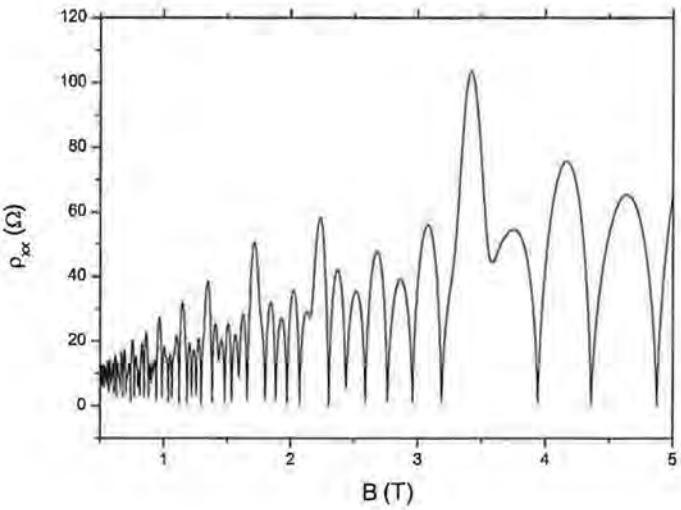

Figura 7.12: Resistividade longitudinal ρ_{xx} em função do campo magnético para $\Gamma = 0.4$ meV. Observamos um número maior de picos em comparação com o caso anterior. Tal fato deve ocorrer devido à presença dos desdobramentos de spin, que agora se tornam mais influentes no comportamento da resistividade devido ao menor valor de Γ utilizado.

A estrutura periódica das oscilações naturalmente ainda permanece quebrada. Porém, observamos uma quantidade maior de picos em ρ_{xx} em relação ao caso com anterior, com $\Gamma = 1.5$ meV. Isso deve corresponder ao desdobramento de spin presente, que agora se torna mais pronunciado na densidade de estados devido ao menor alargamento dos níveis. Além disso, observamos que ρ_{xx} agora oscila também sob campos magnéticos pequenos, diferentemente do caso anterior. Esse fato também é esperado com a diminuição de Γ, que elimina o comportamento contínuo da densidade de estados sob campos magnéticos pequenos.

Avaliando agora a influência de cada desdobramento de spin, tomamos inicialmente $g^* = 0$. A figura (7.14) mostra o resultado do cálculo obtido para ρ_{xx} em comparação com o caso em que g^* tem seu valor real. Observamos que o comportamento de ρ_{xx} muda de maneira significativa para campos

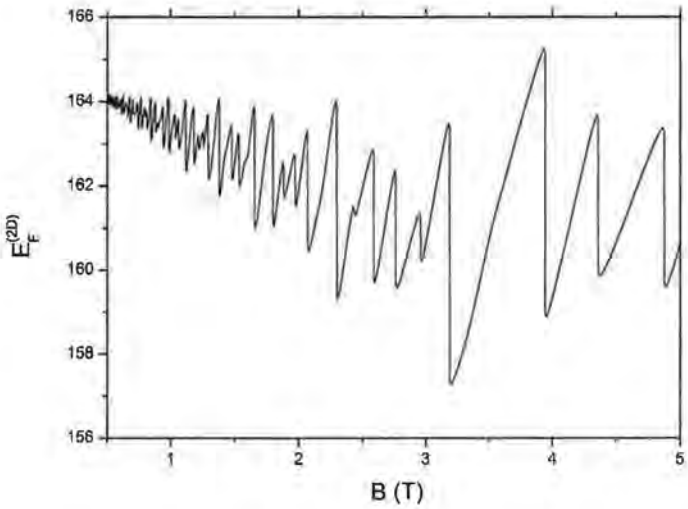

Figura 7.13: Variação do nível de Fermi $E_F^{(2D)}$ em função do campo magnético para $\Gamma = 0.4$ meV.

magnéticos mais intensos. Isso corresponde à situação esperada, uma vez que o desdobramento de spin devido ao efeito Zeeman cresce linearmente com B e é independente do número quântico N.

Tomamos agora as constantes de Rashba nulas: $\alpha_0 = 0$ e $\alpha_1 = 0$. Notemos que como o termo de Rashba em nossos sistema é proporcional a B e a N simultaneamente e o número de autoestados ocupados naturalmente decresce com o aumento de B, não sabemos *a priori* nesse caso qual comportamento devemos esperar para ρ_{xx}.

A figura (7.15) mostra o resultado obtido para ρ_{xx} em comparação com o caso em que α_0 e α_1 não são nulos. Podemos ver que a interação de Rashba revela-se mais relevante sob campos magnéticos pequenos, ao contrário da interação de Zeeman.

Apesar de, como já dito, termos analiticamente a quebra da peridiocidade das oscilações de ρ_{xx} quando consideramos o efeito Rashba, estruturas muito similares a batimentos foram observadas experimental e teoricamente em sistemas com apenas uma sub-banda ocupada sob campos magnéticos pequenos (< 2.0 T) (ver [24] e [44] por exemplo). Tais estruturas não foram, no entanto, observadas em nosso sistema. Acreditamos que isso ocorra devido ao pequeno valor das constantes de Rashba, que faz com que efeitos provenientes da interferência de dois autoestados desdobrados por spin não sejam visíveis na resistividade, uma vez que esse desdobramento é pequeno

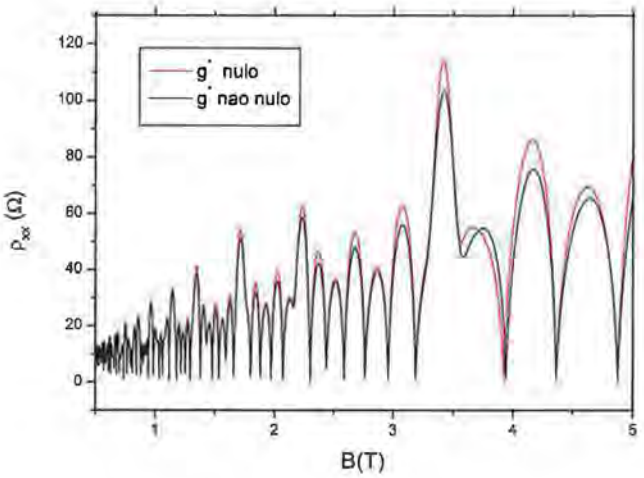

Figura 7.14: Comparação da resistividade longitudinal calculada quando consideramos artificialmente $g^* = 0$. Observamos que o comportamento da resistividade muda de modo cada vez mais significativo conforme aumentamos B. Esse fato é esperado, uma vez que a energia da interação de Zeeman aumenta linearmente com B e é independente do número quântico N.

(notemos que o efeito Zeeman pode ser desprezado nessa região de campos pequenos, conforme visto na seção anterior). Além disso, outra diferença básica é que consideramos duas sub-bandas ocupadas.

Se considerarmos então valores maiores para α_ν, esperamos que tais estruturas similares a batimentos surjam na resistividade. Assim, tomamos artificialmente $\alpha_0 = 200.0$ meV·Å e $\alpha_1 = 150.0$ meV·Å. A figura (7.16) mostra o resultado obtido para ρ_{xx}. Observamos que nesse caso estruturas similares a batimentos de fato existem na região entre 0.5 T e 1.0 T (figura 7.17), concordando com nossa hipótese. Naturalmente, a ocupação da segunda sub-banda torna a resistividade mais complicada, e a similaridade dessas estruturas associadas a batimentos é muito menor; não obstante, resultados experimentais qualitativamente semelhantes são reportados na referência [27], onde, além do efeito Rashba, existem também duas sub-bandas ocupadas. Os valores experimentais obtidos para α_0 e α_1 nessa referência são em média aproximadamente 180 meV·Å e 100 meV·Å respectivamente, que correspondem a valores bastante próximos dos utilizados para o cálculo mostrado na figura (7.16).

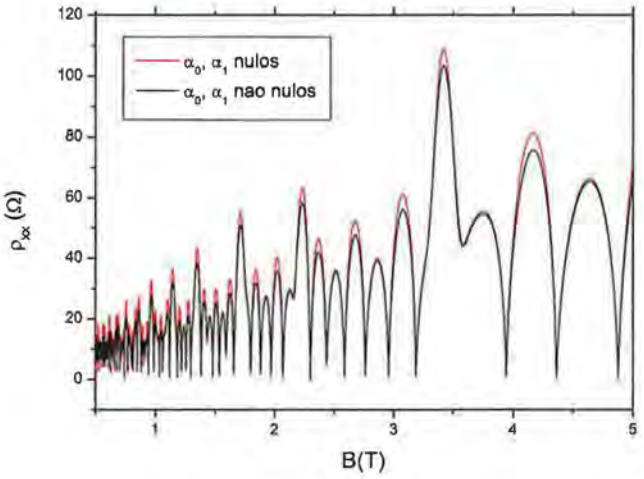

Figura 7.15: Resistividade longitudinal $\rho_{xx}(B)$ quando consideramos artificialmente $\alpha_0 = \alpha_1 = 0$. Vemos que a resistividade sofre alterações mais significativas sob campos magnéticos pequenos.

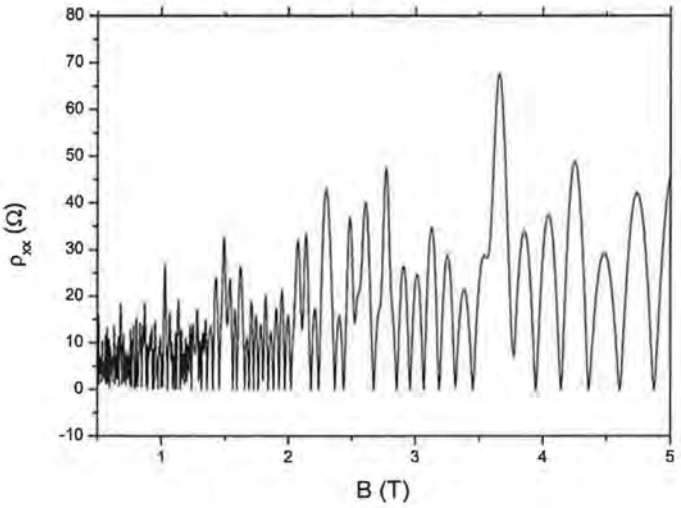

Figura 7.16: Resistividade longitudinal $\rho_{xx}(B)$ quando consideramos artificialmente $\alpha_0 = 200.0$ meV·Å e $\alpha_1 = 150.0$ meV·Å.

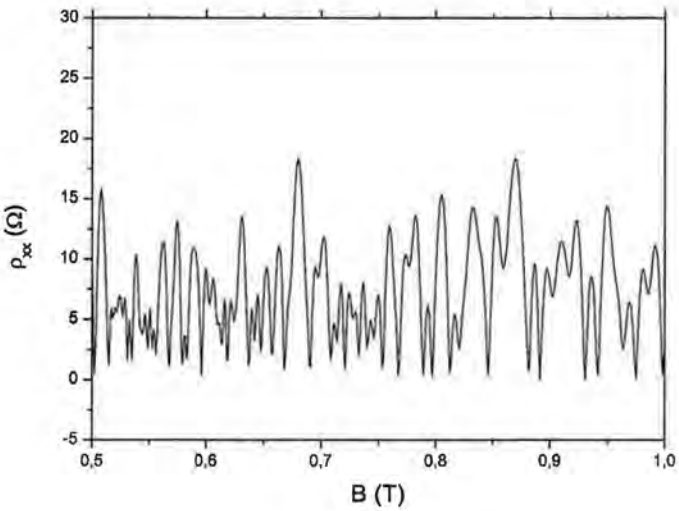

Figura 7.17: Figura (7.16) ampliada para a região de B pequeno. Observamos estruturas similares a batimentos na resistividade.

7.3 Análise qualitativa das oscilações MIS

Resolvendo as equações (4.49) e (4.50), obtemos os campo magnéticos B que geram a ressonância de níveis de energia de mesmo spin. Sob esses valores, esperamos que ocorram picos em $\rho_{xx}(B)$. Nos limitamos aqui a encontrar apenas esses valores de B, uma vez que, como já dito na seção 1.4, não existe até o presente momento modelos analíticos para o estudo das oscilações MIS com a presença do efeito Rashba.

As figuras (7.18) e (7.19) mostram os resultados de tais cálculos. Vemos que, para ambos os casos analisados ($\Gamma = 1.5$ meV e $\Gamma = 0.4$ meV) temos valores de B associados às oscilações MIS muito próximos dos valores de B que geram as oscilações Shubnikov-de Haas. Dessa forma, os efeitos de ambas as oscilações da resistividade devem se sobrepor, não sendo assim possível identificar picos referentes a cada uma delas separadamente. Notemos que as oscilações MIS são na verdade independentes de Γ nos cálculos que consideramos, uma vez que procuramos apenas o alinhamento exato dos níveis de energia com mesma orientação de spin, ignorando o alargamento dos mesmos.

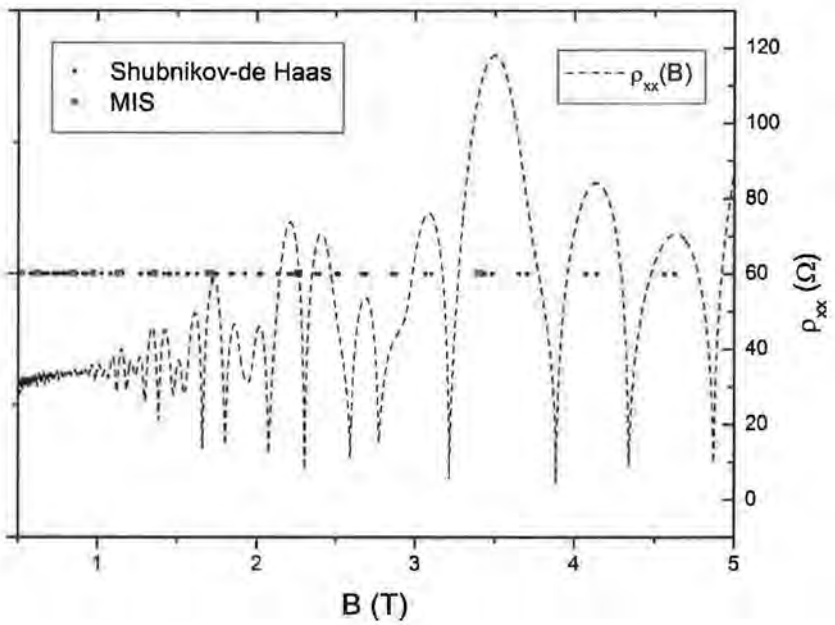

Figura 7.18: Valores do campo magnético B que geram os alinhamentos de níveis de energia relevantes para as oscilações MIS e Shubnikov-de Haas no caso $\Gamma = 1.5$ meV. Vemos que os pontos referentes às oscilações MIS se encontram muito próximos daqueles referentes ao efeito Shubnikov-de Haas, de modo que os efeitos devem na verdade se sobrepor, não possibilitando assim a identificação de picos na resistividade provenientes de cada efeito separadamente.

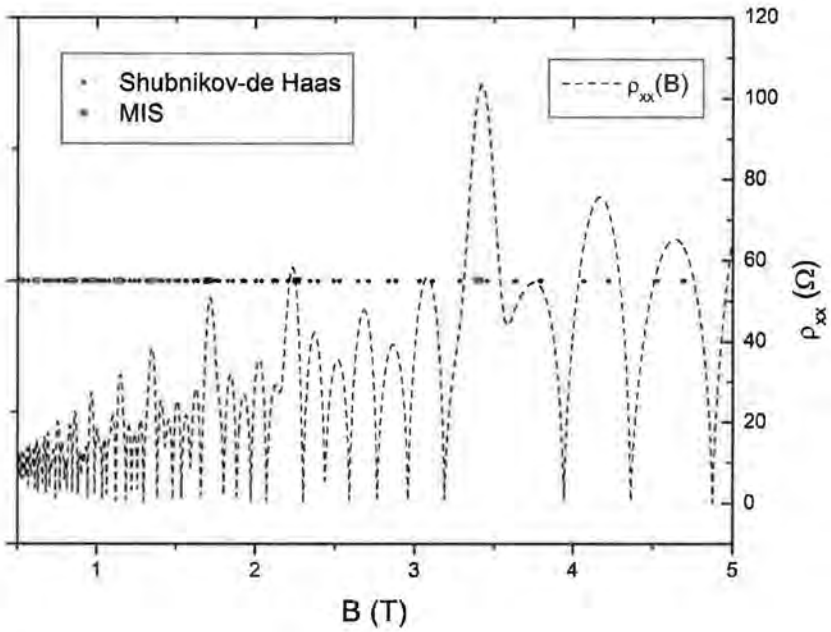

Figura 7.19: Valores do campo magnético B que geram os alinhamentos de níveis de energia relevantes para as oscilações MIS e Shubnikov-de Haas no caso $\Gamma = 0.4$ meV. Novamente, os pontos referentes às oscilações MIS se encontram muito próximos daqueles referentes ao efeito Shubnikov-de Haas, não possibilitando assim, como no caso anterior, a identificação de picos na resistividade provenientes de cada efeito separadamente.

Capítulo 8

Conclusões

Nesse trabalho, calculamos teoricamente a resistividade longitudinal de um poço quântico quadrado duplo formado pela heteroestrutura semicondutora $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$, considerando duas sub-bandas ocupadas e o desdobramento de spin causado pelo efeito Rashba. O modelo adotado para descrever a heteroestrutura é o modelo de Kane 8x8. A partir dele, obtivemos um Hamiltoneano efetivo para os elétrons na banda de condução, que leva a uma expressão para as constantes de acoplamento spin-órbita na heteroestrutura. Analisamos então uma proposta teórica de dispositivo de spin baseado no efeito Rashba existente na literatura [17], onde elucidamos um equívoco conceitual nas hipóteses assumidas. Mostramos também que a tentativa de utilizarmos duas sub-bandas para viabilizar teoricamente o dispositivo descrito na mesma proposta é frustrada pela presença do termo de acoplamento spin-órbita intersub-banda [26].

As constantes de acoplamento spin-órbita foram calculadas através do procedimento autoconsistente. Utilizando valores de dopagens realistas, esse cálculo nos forneceu a constante de acoplamento intersub-banda η e as constantes de Dresselhaus β_ν significativamente menores (em módulo) que as constantes de Rashba α_ν, possibilitando assim uma análise do acoplamento spin-órbita apenas em termos das constantes α_ν.

Deduzimos então os níveis de energia da heteroestrutura na presença simultânea de um campo magnético externo e do efeito Rashba. Esses níveis de energia foram utilizados no cálculo da resistividade longitudinal $\rho_{xx}(B)$. A não-linearidade desses níveis com o campo magnético B não se tornou clara, pois o desdobramento de spin gerado pelo efeito Rashba foi pequeno; não obstante, ela se manifestou indiretamente ao observamos que ρ_{xx} não apresentou estruturas de batimentos, que seriam estruturas características caso tal não-linearidade não existisse. Encontramos também que em nosso sistema o desdobramento de spin devido ao efeito Rashba é predominante

sobre aquele devido ao efeito Zeeman no comportamento de $\rho_{xx}(B)$ para campos magnéticos pequenos (entre 0.5 e 2.0 Tesla, aproximadamente), enquanto o contrário ocorre para campos magnéticos maiores (entre 2.0 e 5.0 Tesla, aproximadamente). Por fim, realizamos o cálculo qualitativo das oscilações MIS, identificando sob quais campos magnéticos B devemos esperar picos em ρ_{xx} devido a esse efeito. Observamos que tais valores do campo magnético obtidos estão muito próximos dos valores que geram os picos referentes ao efeito Shubnikov-de Haas, de modo que ambos os efeitos devem na verdade se sobrepor no comportamento de ρ_{xx}, impossibilitando assim a observação de picos em ρ_{xx} referentes a cada um dos efeitos separadamente.

Dada a crescente importância da spintrônica atualmente, enfatizamos que a teoria desenvolvida aqui pode ser relevante para o estudo da influência do efeito Rashba na magnetoresistência em sistemas com duas sub-bandas ocupadas. Além disso, os cálculos de ρ_{xx} aqui apresentados podem ser utilizados em análises qualitativas ou preliminares da magnetoresistência em heteroestruturas, especialmente para a heteroestrutura $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$. Estudos de heteroestruturas que apresentem valores maiores para as constantes de Rashba (como por exemplo o poço duplo formado pela heteroestrutura $InSb/Al_{0.12}In_{0.88}Sb$ estudado teoricamente em [26]) devem elucidar mais claramente a não-linearidade dos níveis de energia com o campo magnético B, e podem também corresponder a sistemas interessantes para análises da magnetoresistência na presença do efeito Rashba.

Quanto ao cálculo das constantes de acoplamento spin-órbita, melhoramentos podem ser obtidos através da inclusão no cálculo autoconsistente das condições de contorno dependentes de spin e da variação espacial na direção de crescimento da massa efetiva, da permitividade elétrica e de todos os demais parâmetros relevantes para o método $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$.

Uma possibilidade interessante a ser considerada seria incluir o termo de acoplamento intersub-banda η na dedução dada na seção 4.3, que fornece os níveis de energia para a heteroestrutura na presença simultânea do campo magnético e do efeito Rashba (equação 4.32). Isso poderia estender a teoria desenvolvida aqui, e não mais limitarmos à escolha de sistemas que possuam $|\eta| \ll |\alpha_\nu|$, possibilitando assim o estudo de poços quadrados simples, por exemplo.

Por fim, lembramos que, através do uso da aproximação de Hartree, ignoramos os efeitos de troca e correlação eletrônica. Segundo a referência [41], os efeitos de troca se tornam mais relevantes na determinação do fator g^* para campo magnéticos intensos; além disso, lembramos que utilizamos nesse trabalho g^* constante, quando na verdade é sabido que ele varia com o campo magnético em sistemas bidimensionais, como já dito. Assim, acreditamos que os efeitos referentes a interação de troca sejam mais relevantes apenas

no regime de campos magnéticos mais intensos, mantendo então o uso da aproximação de Hartree razoável, uma vez que nos restringimos nesse trabalho a campos magnéticos menores que 5 Tesla. Não obstante, a eventual inclusão de interações de troca e correlação eletrônica naturalmente tornaria o cálculo autoconsistente mais realista, e possibilitaria a extensão da teoria apresentada aqui para campos magnéticos mais intensos. Um exemplo de trabalho considerando a interação de troca e o efeito Rashba é encontrado na referência [52].

Referências Bibliográficas

[1] von KLITZING, K. The quantized Hall Effect. *Nobel Lecture*, 1985.

[2] STÖRMER, H.L. The fractional quantum Hall Effect. *Nobel Lecture*, 1998.

[3] SAKURAI, J.J. **Advanced Quantum Mechanics**. 1.ed. Addison-Wesley, 1967. p.78-94.

[4] WINKLER, R. **Spin-Orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems**. 1.ed. Springer, 2003. 228p.

[5] PRINZ, G.A. Magnetoelectronics. *Science*, v.262, p.1660-1663. 1998.

[6] FERT, A. Nobel Lecture: origin, development and future of spintronics. *Reviews of Moderns Physics*, v.80, n°4, 2008.

[7] RASHBA, E.I. Spintronics: sources and challenge. *Jounal of Superconductivity: Incorporating Novel Magnetism*, v.15, n°1, 2002.

[8] WOLF, S.A. et al. Spintronics: a spin-based electronics vision for the future. *Science*, v.294, p.1488-1495. 2001.

[9] DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, v.56, p.665-668, 1990.

[10] BYCHOV, Y.A.; RASHBA, E.I. Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy. *JETP Letters*, v.39, n°78, 1984.

[11] STUDER, M. et al. Gate-controlled spin-orbit interaction in a parabolic GaAs/AlGaAs quantum well. *Physical Review Letters*, v.103, n°027201, 2009.

[12] CHALAEV, O.; VIGNALE, G. Coulomb-induced spin-orbit coupling in semiconductor quantum wells. *Physical Review Letters*, v.104, n°226601, 2010.

[13] SCHLIEMANN, J.; EGUES, J.C.; LOSS, D. Nonbalistic spin-field-effect transistor. *Physical Review Letters*, v.90, n°14, 2003.

[14] ELDRIDGE, P.S. et al. Rashba spin-splitting of electrons in asymetric quantum wells. *Physical Review B*, v.82, n°045317, 2010.

[15] SANDOVAL, M.A.T. et al. Variational analysis of the Rashba splitting in III-V semiconductor inversion layers. *Physical Review B*, v.83, n°235315, 2011.

[16] EGUES, J.C.; BURKARD, G.; LOSS, D. Datta-Das transistor with enhanced spin control. *Applied Physics Letters*, v.82, n°16, 2003.

[17] KOGA, T. et al. Spin-Filter device based on the Rashba effect using a nonmagnetic resonant tunneling diode. *Physical Review Letters*, v.88, n°12, 2002.

[18] CRUZ, H.; LUIS, D. Possibility of spin device in a triple quantum well system *Journal of Applied Physics*, v.104, n°083715, 2008.

[19] KOGA, T.; SEKINE, Y.; NITTA, J. Experimental realization of a ballistic spin interferometer based on the Rashba effect using a nanolithographically defined square loop array. *Physical Review B*, v.74, n°041302, 2006.

[20] ZUTIC, I.; FABIAN, J. Spintronics: fundamentals and applications. *Reviews of Moderns Physics*, v.76, n°2, 2004.

[21] RIDLEY, B.K. **Quantum Processes in Semiconductors**. 3.ed. Oxford University Press, 1993. p.304-313.

[22] DAVIES, J. H. **The physics of low-dimensional semiconductors**. 1.ed. Cambridge University Press, 1998. 438p.

[23] NITTA, J. et al. Electrical manipulation of spins in the Rashba two dimensional electron gas systems. *Journal of Applied Physics*. v.105, n°122402, 2009.

[24] NITTA, J.; AKAZAKI, T.; TAKAYANAGI, H. Gate control of spin-orbit interaction in an inverted $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ heterostructure. *Physical Review Letters*. v.78, n°7, 1997.

[25] BERNARDES, E. et al. Spin-Orbit Interaction in Symmetric Wells with Two Subbands. *Physical Review Letters*. v.99, n°076603, 2007.

[26] CALSAVERINI, R.S. et al. Intersubband induced spin-orbit interaction in quantum wells. *Physical Review B*, v.78, n°155313, 2008.

[27] SIMMONDS, P.J. et al. Spin-orbit coupling in a $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ quantum well with two populated subbands. *Journal of Applied Physics*. v.103, n°124506, 2008.

[28] VURGAUFTMAN, I.; MEYER, J.R.; RAM-MOHAN, L.R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *Applied Physics Review*. v.89, n°11, 2001.

[29] CANTRELL, D.G.; BUTCHER, P.N. Lifetime broadening of sub-band structure in the electrical conductivity of narrow-channel systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*. v.18, n°5111, 1985.

[30] MAMANI, N.C. et al. Resonance oscillations of magnetoresistance in double quantum wells. *Physical Review B*. v.77, n°205327, 2008.

[31] KANE, E.O. Band structure of narrow gap semiconductors. *Lecture Notes in Physics*, v.133, p.13-31, 1980.

[32] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum Mechanics**. John Wiley, 1977. v.2, p.1030-1034.

[33] CALSAVERINI, R.S.P.A. Acoplamento spin-órbita inter-subbanda em heteroestruturas semicondutoras. 2007. 92p. Dissertação (Mestrado) - Pós-Graduação em Física, Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos.

[34] BASTARD, G. **Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures**. 1.ed. Wiley-Interscience, 1991. 357p.

[35] DRESSELHAUS, G. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. *Physical Review*, v.100, n°2, 1955.

[36] JANCU, J.M. et al. Atomistic spin-orbit coupling and $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ parameters in III-V semiconductors. *Physical Review B*, v.72, n°193201, 2005.

[37] EKENBERG, U.; GVOZDIC, D.M. Analysis of electric-field-induced spin splitting in wide modulation-doped quantum wells. *Physical Review B*, v.78, n°205317, 2008.

[38] SMOLINER, J. et al. Momentum conservation in tunneling processes between barrier-separated 2D-electron-gas systems. *Physical Review Letters*, v.63, n°19, 1989.

[39] SAKURAI, J.J. **Modern quantum mechanics**. Edição revisada. Addison-Wesley, 1994. p.89-94.

[40] ROTH, L.M.; LAX, B.; ZWERDLING, S. Theory of optical magneto-absorption effects in semiconductors. *Physical Review*. v.114, n°1, 1959.

[41] ANDO, T.; FOWLER, A.B.; STERN, F. Eletronic properties of two-dimensional systems. *Reviews of Modern Physics*, v.54, n°2, 1982.

[42] ZHANG, D. Exact Landau levels in two-dimensional systems with Rashba and Dresselhaus spin-orbit interactions in a perpendicular magnetic field. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. v.39, p.L477-L482. 2006.

[43] SERGIO, C.S. et al. Coexistence of a two- and three-dimensional Landau states in a wide parabolic quantum well. *Physical Review B*, v.64, n°115314, 2001.

[44] LUO, J. et al. Effects of inversion asymmetry on electron energy band structures in GaSb/InAs/GaSb quantum wells. *Physical Review B*. v.41, n°7685, 1990.

[45] ASHCROFT, N.W.; MERMIN, N.D. **Solid State Physics**. Harcourt College Publishers, 1976. p.42-47.

[46] GONZÁLEZ, J.L.M.Q.; THOMPSON, D. Getting started with Numerov's method. *Computers in Physics*, v.11, n°5, 1997.

[47] BERNARDES, E. O método numérico de Numerov via computação algébrica. Disponível em <http://www.lia.if.sc.usp.br/2005.html>. Acesso em 8/8/2011.

[48] HARRISON, P. **Quantum wells, wires and dots: theoretical and computacional physics of semiconductor nanostructures**. 2.ed. Wiley-Interscience, 2005. p.73-82.

[49] ZAWADZKI, W.; PFEFFER, P. Spin splitting of subband energies due to inversion assymetry in semiconductor heterostructures. *Semicond. Sci. Technol.* v.19, 2004.

[50] The GNU Multiple Precision Arithmetic Library. Disponível em <http://gmplib.org/>. Acesso em 8/8/2011.

[51] PRESS, H.W. et al. **Numerical recipes in C: the art of scientific computing**. 2.ed. Cambridge University Press, 1992. p.350-354.

[52] YANG, W. et al. Interplay between *s-d* exchange interaction and Rashba effect: Spin-polarized transport. *Applied Physics Letters*, v.89, n°132112, 2006.

Apêndice A

Coeficientes da solução analítica da equação de Poisson para $V_d(z)$

Os coeficientes c_i são existentes na seção 6.4 são

$$c_1 = -\frac{2L_d - w}{2L} wC_- - wC_+ - \frac{eV_g}{2L}, \tag{A.1}$$

$$c_2 = -\frac{1}{2}\left(2L_d - w\right) wC_- - LwC_+ - \frac{eV_g}{2}, \tag{A.2}$$

$$c_3 = \frac{w^2 - 2wL_d + 2LL_d}{2L} C_- + \left(L_d - w\right) C_+ - \frac{eV_g}{2L}, \tag{A.3}$$

$$c_4 = \frac{1}{2}\left(L_d - w\right)^2 C_- + \frac{1}{2}\left(L_d^2 - 2wL\right) C_+ - \frac{eV_g}{2}, \tag{A.4}$$

$$c_5 = \frac{2L - 2L_d + w}{2L} wC_- - \frac{eV_g}{2L}, \tag{A.5}$$

$$c_6 = -\frac{1}{2}\left(2L - 2L_d + w\right) wC_+ - \frac{eV_g}{2}, \tag{A.6}$$

$$c_7 = \frac{w^2 - 2wL_d + 2LL_d}{2L} C_- - \left(L_d - w\right) C_+ - \frac{eV_g}{2L}, \tag{A.7}$$

$$c_8 = -\frac{1}{2}\left(L_d - w\right)^2 C_- + \frac{1}{2}\left(L_d^2 - 2wL\right) C_+ - \frac{eV_g}{2}, \tag{A.8}$$

$$c_9 = -\frac{2L_d - w}{2L} wC_- + wC_+ - \frac{eV_g}{2L}, \tag{A.9}$$

$$c_{10} = \frac{1}{2}\left(2L_d - w\right) wC_- - LwC_+ - \frac{eV_g}{2}, \tag{A.10}$$

com

$$C_\pm = \frac{e^2}{2\kappa}\left(N_a \pm N_b\right). \tag{A.11}$$