Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Propriedades magnéticas e de spin em semicondutores do grupo III-V

Celso de Araujo Duarte

Orientador: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Goussev

Tese apresentada ao
Instituto de Física da Universidade de São Paulo
para a obtenção do título de Doutor em Ciências

Banca examinadora:

Prof. Dr. Guennadii Michailovich Goussev	(orientador – IFUSP)
Prof. Dr. Antonio Domingues dos Santos	(IFUSP)
Prof. Dr. Iouri Poussep	(IFSC)
Prof. Dr. Antonio Carlos Seabra	(EPUSP)
Prof. Dr. Ivan Costa da Cunha Lima	(UERJ)

São Paulo
2006

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

Duarte, Celso de Araujo

Propriedades magnéticas e de spin em
semicondutores do grupo III-V. São Paulo, 2006.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo.
Instituto de Física. Depto. Física dos Materiais e
Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Guennadii Michailovich Goussev

Área de Concentração: Física

Unitermos:

1. Física; 2. Física da matéria condensada; 3. Física do
estado sólido; 4. Propriedades dos sólidos.

USP/IF/SBI-040/2006

Dedico este trabalho à Clauzinha,
à minha família,
e aos meus amigos,

meus companheiros e auxiliares na caminhada.

Que um dia tenhamos paz no mundo,
E que os seus habitantes humanos sejam todos eles nobres e felizes.

Agradecimentos

Meu débito é grande, uma vez que me socorri da ajuda de inúmeras pessoas para a realização de meu trabalho que, na sua forma final, se deve especialmente ao meu atual orientador. No momento de maior dificuldade, foi quem me abriu as portas de sua sala para me receber – sem me conhecer bem – e para me guiar na minha nova jornada, que eu viria a realizar em um novo campo do conhecimento, felizmente muito proveitosa e prazerosa para mim. Antes de tudo, manifesto minha gratidão pela sua humanidade no momento crítico, e também durante estes dois últimos anos finais.

Disse nova jornada porque eu vinha de outro rumo, mas o destino subtraiu do mundo quem guiava meu trabalho, deixando-nos, os vivos, perplexos e perdidos. Sou grato ao falecido Prof. Dr. José Roberto Leite, não só por ter me orientado na primeira metade de meu doutorado, como por me manter como membro do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores.

Também grato à Prof^a. Euzi pelo apoio e por ter me aceito como aluno na fase inicial de meu doutorado, das mãos de quem este passou sucessivamente para o Prof. José Roberto e depois para o Prof. Gusev.

Gratidão também tenho pelo Prof. Alain e pelo colega Dr. Tomas, que cresceram as amostras de poços parabólicos. Pelos colegas do MBE e do LNMS por suas eventuais ajuda, e pelo convívio, felizmente pacífico.

Gratidão também por pessoas que se prestaram de incomum boa vontade, cujo gesto ficou registrado em mim e que, se eu for generoso, um dia os imitarei: o Prof. Antonio (Toninho) e o Sergio, ambos do LMM, fazendo deposição de filmes de Au, SiN, etc.; a Prof^a. Vera Salvador (IPEN) por medidas de dispersão de raios X; o Dr. Chubaci (DFN), por medidas de refletância; o Marcel Dupret (FAP), por medidas de RBS; o Prof. Pedro Vitoriano (IQ), por medidas de espectroscopia; os Profs. Zawislak, Boudinov (IFRGS), Sebastião (LSI – Poli) e Marcelo (LME – Poli), por implantação iônica, tratamento térmico e deposição de filmes em amostras; o Prof. Freitas (NRL – Washington), por fornecer amostras de h-GaN e por me apoiar num momento crítico; o Prof. Seabra, o Alexandre e demais membros do LSI – Poli, bem como a Rita (LME – Poli), e o Prof. Pusep do IFSC, com respeito à litografia nas amostras de poços parabólicos, deposição de Au etc..

Também gratidão pelo Prof. Portal do GHMFL – Grenoble, por oferecer o seu laboratório para medições, fundamentais para este trabalho; pelos Drs. Julio e Rafael, pelo auxílio em medidas de foto refletância e espalhamento Raman; pelo Prof. Valmir, por medidas de Hall em amostras de GaN; pelo Prof. Lishka (Universidade de Paderborn, Alemanha), pelo fornecimento de amostras de c-GaN.

Disse eu que meu débito era grande, cabe ao leitor se conformar com a extensão desta lista.

Ao Geraldo, por apoio técnico eventual em problemas de equipamento; à Márcia Ribeiro por zelar pelo equipamento de fotoluminescência e pela bobina; e também ao Sr. Francisco de Paula (Paulinho), incansável e atencioso trabalhador a quem o IF muito deve.

À Mônica, diligentíssima secretária, bem como a sua atual recém-substituta, Tatiana.

Aos colegas do MBE, viajantes da mesma nau, especialmente por aquele convívio que já declarei pacífico, tendo sido algo bem a mais que isso: Ivan, Luis, Niko, Angela, Tomas (bis), Geraldo (bis), etc.

À Odille e ao Prof. Myers, pelo apoio no momento crítico, confiança e amizade, sou grato.

Tenho gratidão pela relativa paz em meu trabalho, especialmente quando lembro que vivi protegido dos males comuns do ambiente profissional em nossos dias.

Enfim, aos merecedores da dedicatória, meus pais e meus irmãos, pelo que me ajudaram; à minha companheira Claudia, que me ajudou muito no preparo da apresentação deste trabalho – e também a “acender a luz para enxergar as coisas”, acompanhando meus passos. À Kerlley, ao João, à Celize, pela amizade; à Márcia Cunha e à ACCV pelo novo estímulo de vida; ao Prof. Antonio Tadeu pela amizade e por ter me incentivado a estudar Física; e meus demais amigos, cujos nomes não aparecem aqui – todos eles o pedaço da humanidade que me é mais familiar.

Tenho gratidão por ter chegado aqui, por ter feito o que fiz, tendo errado ou acertado. Acredito que, no futuro, serei mais grato ainda quando, mais amadurecido e menos desajeitado, haverei de me rejubilar e entender melhor as coisas, descobrindo que tudo foi o semear para uma colheita posterior.

Resumo

Neste trabalho, apresentamos o resultado de nossas investigações em amostras de poços quânticos parabólicos (PQW) de AlGaAs crescidas em substratos de GaAs por MBE (*Molecular Beam Epitaxy*).

Nossos estudos se concentram nas implicações da variação do fator g de Landé ao longo da estrutura dos PQW, a qual ocorre em virtude da dependência dessa grandeza com respeito ao conteúdo de Al na liga AlGaAs. Essas implicações são analisadas através de medidas de transporte eletrônico (medidas de Hall e do efeito Shubnikov-de Haas).

As medidas de Shubnikov-de Haas a temperaturas da ordem de dezenas a centenas de milikelvin com variação do ângulo de inclinação se mostram um eficiente método para a determinação do fator g . Distinguimos não só o fator g determinado pelas propriedades da liga, como também uma contribuição oriunda de efeitos de muitos corpos (contribuição de troca).

Por outro lado, as medidas de Hall nos revelam um comportamento anômalo, que mostramos não ter origem no conhecido “efeito Hall anômalo” presente em materiais ferromagnéticos, nem em efeitos de ocupação de múltiplas sub-bandas. Atribuímos o fenômeno a um efeito “válvula de spin”, conseqüente da variação espacial do fator g .

Nossas observações nos permitem a idealização de um transistor “válvula de spin”, prescindindo do emprego de materiais magnéticos.

Abstract

We present the results of our investigations concerning MBE grown AlGaAs/GaAs parabolic quantum well (PQW) samples.

We focused on the variation of the Landé g factor along the structure of the PQWs, which occur as a consequence of its dependence on the Al content on the alloy AlGaAs. The implications are studied by Hall and Shubnikov-de Haas measurements.

Shubnikov-de Haas measurements at temperatures of the order of tenths to hundreds of milikelvin with variation of the tilt angle are shown to be an efficient method for the determination of the g factor. We could distinguish not only the alloy g factor, but its many body contribution (exchange contribution).

On the other hand, Hall measurements exhibit an unusual behavior, which we proved it has no relation neither to the well known “anomalous Hall effect”, a characteristic of ferromagnetic materials, nor to a multi subband occupation effect. We attribute such behavior to a “spin valve effect”, caused by the spatial variation of the g factor.

Our observations allow us to idealize a “spin valve” transistor, without any ferromagnetic material in its structure.

Sumário

Introdução	1
Capítulo 1 – Conceitos fundamentais	
1. Poços quânticos parabólicos	7
2. Determinação autoconsistente da ocupação de níveis em poços quânticos parabólicos	10
3. Os efeitos Hall e Shubnikov-de Haas	15
O efeito Hall e o efeito Hall quântico	15
O efeito Shubnikov-de Haas	19
Oscilações da magnetorresistência a campo alto	21
4. O fator g de Landé em AlGaAs	26
5. O gap de spin e a contribuição de efeitos de muitos corpos	28
6. O colapso do gap de spin	31
Capítulo 2 – Estrutura e propriedades básicas das amostras estudadas, e equipamentos de medida	
1. Plano de crescimento das amostras	35
Potenciais analógicos e digitais: cálculos comparativos	36
2. Estrutura das amostras	39
3. Preparo das amostras para a realização de medidas	40
4. Equipamentos para as medidas experimentais	43
5. Resultados de medidas de Shubnikov-de Haas e Hall	43
Capítulo 3 – Investigações sobre a variação do fator g de Landé em poços quânticos parabólicos de AlGaAs/GaAs	
1. O fator g_0 em poços quânticos parabólicos	45
Cálculo do fator g_0 médio	46
2. Observações sobre a variação do fator g com o campo magnético	48
3. Determinação experimental de $\langle g_0 \rangle$: o colapso do gap de spin	52
Conclusões do capítulo 3	60
Capítulo 4 – O efeito válvula de spin em poços quânticos parabólicos de AlGaAs/GaAs	
1. O efeito válvula de spin – teste com medidas de transporte	61
Efeitos de ocupação de múltiplas sub-bandas	66
Possibilidade de ocorrência de efeito Hall anômalo	70
Efeito da variação do fator g de Landé	71
Contribuição de troca para o fator g	73
Ação do campo magnético na função de onda	74
Nota final – Prova da inequação 44	77
Conclusões do capítulo 4	78

Capítulo 5 – Perspectiva: o transistor válvula de spin de AlGaAs/GaAs	
1. O transistor válvula de spin	79
Aplicações do transistor válvula de spin	81
Contribuição de troca e ângulo de inclinação do campo	82
Transistor de spin de poço trapezoidal	82
O efeito válvula de spin no transistor de spin	84
Conclusões do capítulo 5	90
 Conclusões	 91
 Referências	 92
 Anexos	 96

Introdução

O estudo das propriedades dos materiais, fomentado não só pela avidez do mercado consumista como também pela necessidade em áreas aplicadas, tem dado novas fronteiras à Ciência.

A eletrônica “*solid state*” gerou um progresso tecnológico vertiginoso, bem caracterizado pela *lei de Moore*, da década de 70: a cada um ano e meio a capacidade de um *chip* aproximadamente dobra, independentemente de seu tamanho [1]. O crescimento exponencial da quantidade de informação com que hoje em dia lidamos pede equipamentos mais rápidos e sofisticados. Buscando continuamente reduzir o tamanho de dispositivos, aumentar sua eficiência e sua rapidez de processamento, certamente chegaremos a um ponto extremo: historicamente, as dimensões características dos dispositivos microeletrônicos têm caído à metade de seu valor a cada quatro anos. Assim, em torno do ano 2040 chegaremos a estruturas com dimensões em escala atômica. O desempenho dos dispositivos não acompanha essa redução de tamanho, apesar de inúmeros esforços. Em situações como essa, é conveniente a procura de caminhos diferentes dos que se vem seguindo.

E, de fato, estamos acompanhando o surgimento de novos ramos da Ciência, que prometem trazer soluções a esses problemas – além da Nanociência, despontam a “Spintrônica” ou eletrônica do spin, a “Computação Quântica” etc..

Se, por um lado, a eletrônica convencional se baseia na carga do elétron, a *spintrônica* – área que inspirou nosso trabalho – vem abrir novas possibilidades graças a sua promessa de empregar as propriedades do spin do elétron, além das de sua carga.

Nossa tecnologia emprega fundamentalmente a carga elétrica como veículo de informação e energia. Ela frutificou a tecnologia que conhecemos a partir do conhecimento da eletricidade, suas manifestações e propriedades. Se tal tecnologia surgiu do estudo das manifestações naturais “tangíveis” pelos nossos sentidos – como os relâmpagos e as eletrizações de objetos –, a spintrônica tem origem num ente natural aquém de nossa percepção: o *spin*.

Exibindo notáveis propriedades oriundas de seu caráter puramente quântico, o spin promete incontáveis possibilidades. E promessas que antes pareceriam um sonho, surgem ante nossos olhos por intermédio de uma ciência de já um século – a Mecânica Quântica –, cujas leis governam nosso microcosmo.

Se por um lado a eletrônica – ainda que tenha bases na Mecânica Quântica – se fundamenta em conceitos clássicos da Eletrostática e da Eletrodinâmica associados à carga elétrica (em outras palavras, a lei de Coulomb e as equações de Maxwell), a spintrônica traz a emergência de um novo linguajar, com termos como “emaranhamento” (*entanglement*), coerência etc., os quais fogem ao âmbito da Física Clássica.

A spintrônica se propõe a possibilitar o controle e a manipulação do spin, com os quais se possa desenvolver uma nova tecnologia complementar à eletrônica do silício e demais semicondutores.

Se bem que ainda esteja no estágio inicial de investigação, em que inexistem “circuitos spintrônicos” [2], já foram idealizados e testados alguns dispositivos com sucesso. O mais conhecido, é a cabeça de gravação e leitura de discos rígidos de computadores, baseada no princípio da *magnetoresistência gigante* (*GMR, Giant MagnetoResistance*), que encontrou vultosa aplicação comercial. É possível que, dentro de algum tempo, venhamos encontrar no mercado uma variedade de equipamentos ultra-sofisticados, complexos e versáteis.

Entre os vários problemas que impedem o desenvolvimento da spintrônica, destaca-se o desconhecimento de como interligar sequencialmente vários dispositivos spintrônicos sem haver perda de coerência do spin dos portadores (o que significa a perda da informação carregada pelo spin). Essa dificuldade tem como causas principais: 1) a limitação intrínseca do tempo de coerência do spin nos materiais; 2) a dificuldade de conservar a coerência nas regiões de interface entre materiais diferentes, especialmente do tipo metal ferromagnético-semicondutor; e 3) a influência da temperatura.

É com a finalidade de resolver esses problemas que se tem investigado intensamente diversos materiais para a aplicação na spintrônica.

Uma categoria de materiais indicados para a aplicação na spintrônica é a dos semicondutores magnéticos, por exemplo, calcogenetos de európio [3]. Entretanto, *integrar* materiais como esses à tecnologia atual – já difíceis de produzir –, significa na prática, a habilidade de crescer filmes finos em substratos semicondutores como Si, AlGaAs, GaN, InP etc. A diferença entre estruturas cristalinas e parâmetros de rede resulta em filmes de má qualidade cristalina, o que os torna inapropriados à spintrônica, uma vez que somente em estruturas de alta qualidade pode-se ter reduzida taxa de espalhamento que proporciona longos tempos de coerência. Na prática, opta-se por uma solução alternativa, criando materiais híbridos de semicondutores e magnéticos, denominados “semicondutores magnéticos diluídos” (*Diluted Magnetic Semiconductors, DMS*). [4] Cresce-se uma liga de

material semicondutor com uma fração Mn, ou outro metal de transição, magnéticos, como Fe, Cr, Co, Ni, V [5] (ou terras raras).

Entretanto, mesmo o crescimento dos DMS pode ser problemático. Há fatores a considerar, como a solubilidade do metal escolhido na matriz semicondutora e sua afinidade com esse substrato. Durante o crescimento de um filme de DMS, pode haver fenômenos de segregação, impedindo a formação de uma liga homogênea. A formação de coalescências (*clusters*) descaracteriza as propriedades da liga pura, tornando-a inadequada para uma possível aplicação na spintrônica. Dessa maneira, é necessário um rigoroso controle das condições de crescimento da liga para evitar a formação dessas coalescências. Em paralelo, é conveniente o estudo teórico da liga que se pretende crescer, identificando em que faixa de concentração pode-se encontrar comportamento ferromagnético.

Uma das maneiras de se produzir DMS é através da implantação iônica – técnica essa já correntemente usada para a dopagem de semicondutores [6]. Ao invés de se crescer diretamente a liga *semicondutor + metal de transição*, opta-se por implantar o semicondutor com íons do metal. Com esse procedimento, evita-se em princípio qualquer efeito indesejado de segregação, o que poderia ocorrer no caso do crescimento direto, por técnicas como MBE (*Molecular Beam Epitaxy*). Além do mais, permite um melhor controle da distribuição dos íons. Entretanto, a desvantagem é o dano causado à estrutura cristalina, o qual só pode ser *parcialmente* eliminado através de um tratamento térmico posterior.

Na prática, pode-se perguntar qual a finalidade de se estudar um DMS produzido por implantação, já que os defeitos cristalinos são um empecilho à criação de dispositivos spintrônicos. Entretanto, não deixa de ser para nós uma oportunidade de investigação, onde poderemos aferir uma série de propriedades do material. Além do mais, é uma maneira de, numa primeira instância, se produzir esse material, especialmente no caso em que não se dispõe da possibilidade de crescer diretamente o DMS por MBE ou outra técnica refinada. Diversos autores já se ocuparam da investigação das propriedades de semicondutores implantados, analisando suas propriedades estruturais, ópticas e magnéticas, em que destacamos o caso do GaN, que estudamos em nosso trabalho. [7] Notemos ainda que os resultados de vários grupos de estudiosos revela que o GaN tem grande resistência estrutural, face aos danos de implantação, se comparado ao Si ou ao GaAs. [6, 8]

Nosso trabalho incluiu, inicialmente, o estudo de amostras de GaN implantadas com Mn. A escolha do GaN como substrato semicondutor teve como base um conhecido trabalho teórico de Dietl *et al.* [9] baseado no modelo de Zener para o ferromagnetismo,

segundo o qual o GaN com 5% de dopagem de Mn, apresenta comportamento ferromagnético à temperatura ambiente, enquanto outros semicondutores têm temperaturas críticas muito baixas, inviabilizando a aplicação em dispositivos comercializáveis. Boseli *et. al.*, em simulações de Monte Carlo, estudaram o ferromagnetismo na fase metálica da liga GaMnN de estrutura cúbica, prevendo temperaturas de transição de Curie superiores à temperatura ambiente [10]. Além do mais, nosso grupo de pesquisa no Laboratório de Novos Materiais Semicondutores vem desenvolvendo longo trabalho em torno dos nitretos do grupo III, muito especialmente o GaN, que alcançou notoriedade com o famoso trabalho de Nakamura. [11] Uma vez que o GaN pode ser crescido nas fases hexagonal (estrutura de wurtzita) e cúbica (estrutura de blenda de zinco), estudamos essas duas fases do material. Diversos trabalhos já foram feitos sobre implantação de íons de metais de transição em GaN, entretanto, considerando apenas a fase hexagonal. [12] A contribuição de nosso trabalho está no estudo da implantação na fase cúbica, e de suas propriedades estruturais, ópticas e magnéticas como um todo. [13]

Uma vez que a máquina de MBE disponível em nosso laboratório não opera com nitretos (e sim arsenetos), estudamos e implantamos amostras cedidas por instituições de pesquisa estrangeiras com as quais mantemos colaboração, o *Naval Research Laboratory* (Washington, EUA) e a *Universität Paderborn* (Paderborn, Alemanha).

Entretanto, há outro caminho alternativo para o controle do spin que prescinde do emprego de DMS, e é através da manipulação do fator g de Landé. Não podemos na verdade modificar por nenhum meio o fator g de um material, uma vez que ele é uma propriedade intrínseca deste. No máximo, podemos esperar que alguma modificação possa ser conseguida variando a densidade de portadores na estrutura (semicondutora), por exemplo, pela aplicação de potenciais elétricos moduladores, já que efeitos de interação de muitos corpos têm impacto no fator g . Entretanto, podemos tentar outro caminho mais simples: sabendo-se que na liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ o fator g depende fortemente do conteúdo x de Al, [14] podemos nos aproveitar desse fato e tentar construir dispositivos spintrônicos. É esse o propósito principal de nosso trabalho. Estudando medidas de Shubnikov-de Haas (SdH) e Hall em amostras de poços quânticos parabólicos (PQW, *Parabolic Quantum Wells*) de AlGaAs crescidas em substratos de GaAs, verificamos que o gás bidimensional de elétrons (2DEG, *Two Dimensional Electron Gas*) confinado no PQW passa por transições de estados de spin dependendo do fator g médio, de acordo com a localização do 2DEG ao longo do PQW, a qual é modulada através da aplicação de um potencial elétrico

externo. Esse fenômeno está ligado ao que se designa por *efeito válvula de spin* (*spin valve effect*), graças ao qual pode-se, em princípio, construir um *transistor válvula de spin* (*spin valve transistor*), [15] mas, diferentemente da literatura, não é necessário o emprego de materiais com propriedades magnéticas.

Esse sistema constituído por um 2DEG num PQW pode assim, em princípio, transpor a dificuldade tecnológica da realização de interfaces semicondutor-ferromagneto com boa qualidade. Ressaltemos também a simplicidade do sistema, que emprega um material semicondutor de largo uso comercial (AlGaAs) – sem falar que eventualmente pode-se empregar outras ligas semicondutoras que tenham a mesma funcionalidade.

Neste trabalho, apresentaremos somente os nossos estudos sobre amostras de PQW. A razão disso é o fato de que os estudos sobre GaN cúbico implantado tinham a orientação do Prof. Dr. José Roberto Leite, cujo falecimento obrigou-nos à sua suspensão em estágio incompleto. Apresentamos somente, em anexo, uma publicação no periódico *Appl. Phys. Lett.* que contém os resultados da análise completa do primeiro conjunto de amostras. Em contrapartida, os estudos sobre PQW foram feitos sob a orientação do Prof. Dr. Guennadii M. Gusev, cuja linha de pesquisa concentra-se no estudo de propriedades de transporte eletrônico.

Na apresentação deste trabalho, começamos pela introdução de conceitos básicos no capítulo 1, e das propriedades das amostras estudadas no capítulo 2. A seguir, nossas investigações se subdividem em três estudos intimamente relacionados: no capítulo 3, inicialmente mostraremos de que maneira varia o fator g de Landé em PQW, auxiliados por modelos baseados na teoria **k.p** [16] e por medidas de SdH. Esses estudos são acompanhados por cálculos autoconsistentes da densidade eletrônica no PQW com o fim de determinar o fator g efetivo, realizados com o auxílio de um programa que desenvolvemos. Através de medidas de SdH, distinguimos duas contribuições conhecidas para o fator g : a contribuição de bandas g_0 intrínseca ao material, deduzida a partir da teoria **k.p** (*bare contribution*) e a advinda de efeitos de troca (*exchange contribution*). Estudamos também a variação do valor médio de g_0 ao longo de um PQW, em função de potenciais moduladores externos. [17] Estudos semelhantes já foram feitos por outros autores empregando medidas ópticas. [18]

O segundo estudo, no capítulo 4, é o do efeito válvula de spin (*spin valve*) em PQW: valendo-nos de medidas de Hall em campo magnético quase paralelo, mostramos que as curvas de resistividade Hall em função do campo se desviam do comportamento linear esperado. Mostramos que esse comportamento não pode ser interpretado como o

conhecido efeito hall anômalo, característico de materiais ferromagnéticos, nem como um efeito da ocupação de múltiplas sub-bandas de energia nos PQW; antes, é o resultado da manifestação do efeito “válvula de spin” (*spin valve effect*) devido a um *gap* de energia de Zeeman associado à variação do fator g ao longo do PQW [19].

Esses dois estudos nos levam naturalmente ao terceiro, que considera a possibilidade de construir um transistor válvula de spin empregando PQWs de AlGaAs, sem o concurso de materiais com propriedades ferromagnéticas. Nossa proposta para um transistor válvula de spin é apresentada no capítulo 5.

Por fim, encerraremos nossa apresentação com as conclusões do trabalho, relatando nossas impressões finais.

Capítulo 1

Conceitos fundamentais

1. Poços quânticos parabólicos

Os recentes avanços na técnica de epitaxia de feixe molecular – MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) –, têm possibilitado a criação de inúmeras estruturas artificiais com propriedades singulares, como os poços, fios e pontos quânticos, denominadas genericamente *heteroestruturas*. O estudo dessas estruturas não só rendeu avanços na Física de Estado Sólido, como também deu origem a inúmeros dispositivos com larga aplicação comercial.

Dentre essas estruturas, destacamos como objeto de nosso estudo os poços quânticos parabólicos – cujo nome advém da forma parabólica da banda de condução e que passaremos a denominar simplesmente como PQW (*Parabolic Quantum Wells*) – remotamente dopados de AlGaAs crescidos em substratos de GaAs. Consegue-se produzir um PQW de AlGaAs variando gradualmente o teor de Al na liga. Escolhendo-se como ponto de referência o GaAs, a posição relativa da banda de condução da liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é dada pela fórmula $V(x) = 0,693x + 0,222x^2$ (em eV) [20]. Sendo assim, para se obter um perfil de potencial parabólico da forma:

$$1. \quad V(z) = a(z - z_0)^2$$

basta crescer a heteroestrutura com uma variação espacial da liga obedecendo a:

$$2. \quad x(z) = 1,561 \left[\sqrt{1 + 1,849a(z - z_0)^2} - 1 \right]$$

onde a é um parâmetro constante e z_0 a posição do centro do PQW.

A figura 1 representa o perfil da banda de condução de um PQW. Os parâmetros característicos principais são a largura L e a altura Δ_I do poço, relacionados a a por $a = 4\Delta_I/L^2$. Com o objetivo de obter amostras de melhor mobilidade, a altura da barreira Δ_2 em geral é diferente de zero. Para o estudo das propriedades de transporte em PQW, é necessário enchê-lo com elétrons ou com buracos (caso que não estudaremos), crescendo-se duas camadas de dopagem delta de Si fora do PQW, em posições simétricas cuja distância do PQW é denominada *spacer*. Essa separação contribui positivamente para a mobilidade.

Figura 1 – Esquema representativo do perfil da banda de condução de um PQW típico.

Sob o ponto de vista da eletrostática, o potencial parabólico é equivalente ao produzido por uma densidade de carga positiva uniforme n^+ . De fato, substituindo o potencial parabólico $V(z) = a(z - z_0)^2$ na equação de Poisson unidimensional $\partial_z^2 V(z) = e^2 / (\epsilon_0 \epsilon) n^+$, obtemos diretamente:

$$3. \quad n^+ = \frac{8\epsilon_0 \epsilon \Delta_1}{e^2 L^2},$$

sendo um importante parâmetro característico dos PQW.

Com a introdução da dopagem delta, os elétrons são capturados pelo potencial do PQW, e este se torna um canal passível de condução elétrica. Ao mesmo tempo, a repulsão entre os elétrons confinados no PQW modifica o potencial total, cuja forma resultante se caracteriza principalmente pelo achatamento do fundo do PQW, como se representa na figura 2. A forma do potencial total pode ser calculada resolvendo-se as equações de Schrödinger e de Poisson de modo autoconsistente, como explicaremos na próxima seção.

Figura 2 – Esquema representativo do perfil da banda de condução do mesmo PQW da figura anterior, após a captura dos elétrons das camadas de dopagem delta pelo PQW. Os parâmetros Δ_1 e Δ_2 são apresentados apenas para a visualização do achatamento da concavidade.

Dependendo da largura L e da altura Δ_l do PQW, a solução do problema autoconsistente pode revelar a ocupação de uma ou mais sub-bandas de energia. Para uma dada concentração (densidade superficial) de elétrons n_s , os poços largos tendem a ter maior número de sub-bandas ocupadas do que os estreitos, devido aos valores menores das energias de confinamento. A solução autoconsistente dá o potencial autoconsistente, o número de sub-bandas ocupadas e respectivas energias, concentrações e distribuições espaciais de elétrons. Em casos de dopagem elevada, a parte côncava da figura 1 se torna praticamente plana (de modo que o PQW cheio se assemelha a um poço quadrado vazio de altura Δ_2) ou mesmo convexa. Quando $n_s = n^+ \times L$, temos um PQW cheio. Define-se então o percentual de preenchimento de um PQW através da grandeza $n_s / (n^+ L)$.

Normalmente a distribuição de elétrons se concentra na parte central do PQW. Nas regiões das dopagens delta, localizadas fora do PQW, a densidade de elétrons é insignificante, bem como a amplitude das funções de onda $\psi(z) = \langle z | \psi \rangle$ ($|\psi\rangle$ representa um auto-estado). Por outro lado, as dopagens representam um potencial espalhador aleatório V , cujos elementos de matriz $\langle \phi | V | \psi \rangle = \int \langle \phi | z \rangle V(z) \langle z | \psi \rangle dz = \int V(z) \langle z | \phi \rangle^* \langle z | \psi \rangle dz$ determinam os tempos de transporte e mobilidades de sub-

bandas [21]. Sendo as amplitudes desprezíveis, segue que também o serão esses elementos de matriz. Isso possibilita que a amostra apresente excelentes propriedades de transporte, conforme dissemos – em oposição à inclusão de dopantes *dentro* do poço, onde os elementos de matriz teriam valor apreciável.

Os PQW têm uma propriedade adicional: aplicando-se potenciais elétricos externos ao longo da direção de crescimento z , promove-se apenas (em aproximação) o deslocamento da densidade espacial de elétrons ao longo desse eixo. A razão disso é simples: se denotarmos a função potencial do PQW por $V(z) = a(z - z_0)^2$, onde z_0 é a posição do centro da concavidade, a aplicação de um campo elétrico constante E representará a adição de um termo eEz ao potencial, de modo que o potencial resultante será também parabólico, como o mostra uma simples manipulação matemática:

$$4. \quad V'(z) = V(z) + eEz = a(z - z_0)^2 + eEz \equiv a[z - z_0']^2.$$

Assim, a menos de uma constante aditiva, o centro do poço se desloca de z_0 para a posição $z_0' = z_0 + eE/2a$ com a aplicação do campo elétrico. Notemos em particular que o deslocamento $eE/2a$ é proporcional ao campo elétrico. Do mesmo modo, a densidade eletrônica sofrerá um deslocamento idêntico conservando sua forma. No caso real, o deslocamento é ligeiramente diferente e ocorre também uma alteração da forma do potencial, uma vez que o poço parabólico de uma amostra é finito. O achatamento do fundo do poço, causado por concentrações elevadas de elétrons, também concorre para a modificação do quadro, mas em linhas gerais as aproximações subentendidas pela equação 2 são satisfatórias em casos de baixa dopagem. Observemos que, para poços de perfil não parabólico (quadrados, triangulares etc.) não há preservação da forma do potencial e da forma da densidade eletrônica mediante a ação de campos elétricos externos.

2. Determinação autoconsistente da ocupação de níveis em poços quânticos parabólicos

O problema da autoconsistência do sistema de equações de Schrödinger e de Poisson unidimensional – que nos interessa –, consiste na busca de um conjunto de N autofunções envelope normalizadas ψ_i e autovalores E_i ($i = 1, 2, \dots, N$) que satisfaçam simultaneamente as equações [22]:

5.

$$\begin{cases}
 \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right) \psi_i(z) = E_i \psi_i(z) & (A) \\
 \frac{\partial^2 V_{ee}(z)}{\partial z^2} = \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon} n(z) & (B) \\
 V(z) = V_{BC}(z) + eEz + V_{ee}(z) + V_{tc}(z) & (C) \\
 V_{tc}(z) = - \left[1 + 0,7734x \ln \left(1 + \frac{1}{x} \right) \right] \frac{2}{\pi \alpha r_s} Ry^* & (D) \\
 n(z) = n_{s,i} \sum_{i=1}^N |\psi_i(z)|^2 & (E) \\
 n_{s,i} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_i) & (i = 1, 2, \dots, N) \quad (F) \\
 x = \frac{r_s}{21} & (G) \\
 r_s = \left(\frac{4\pi a_B^3}{3} n(z) \right)^{-1/3} & (H) \\
 a_B = \frac{4\pi \epsilon_0 \epsilon \hbar^2}{m^* e^2} & (I) \\
 \alpha = \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3} & (K)
 \end{cases}$$

As equações 5.A e 5.B são as equações de Schrödinger (ou, mais precisamente, a *equação da massa efetiva* [23]) e de Poisson unidimensionais. $V(z)$ é o potencial total (equação 5.C), que compreende o potencial da banda de condução $V_{BC}(z)$ intrínseco à estrutura, o campo elétrico externo perpendicular à amostra E , o potencial de repulsão eletrostática entre elétrons $V_{ee}(z)$ e o potencial de troca e correlação $V_{tc}(z)$ (equação 5.D) [24]. $V_{ee}(z)$ é determinado pela equação de Poisson em função da densidade de elétrons por unidade de volume $n(z)$, a qual por sua vez é dada pela equação 5.E como a contribuição das densidades eletrônicas de cada uma das N sub-bandas ocupadas, que dependem da concentração (superficial) de elétrons de cada sub-banda $n_{s,i}$ e das funções de onda normalizadas $\psi_i(z)$. As concentrações $n_{s,i}$ são funções das auto-energias E_i e da energia de Fermi do sistema E_F , conforme dado pela equação 5.F. Esse conjunto de equações depende dos parâmetros adimensionais x e r_s (equações 5.G e 5.H), que dependem do raio de Bohr do material a_B (equação 5.I). Em todas essas

expressões, ε é a constante dielétrica do material, m^* é a massa efetiva do elétron e Ry^* (unidade de energia do potencial de troca e correlação) é o Rydberg efetivo, $1Ry^* = e^2 / (8\pi\varepsilon_0\varepsilon a_B)$ (em unidades do sistema MKS).

Esse problema é bem conhecido e estudado, e a sua solução é obtida por meio de cálculos numéricos [22]. Para a realização de cálculos autoconsistentes, desenvolvemos, portanto, um programa em FORTRAN 95. Uma das finalidades essenciais da elaboração desse programa foi a obtenção da densidade espacial eletrônica, o que possibilitou determinar o fator g de Landé médio em PQW, conforme explicaremos mais tarde. Outra utilidade foi a determinação do número de sub-bandas ocupadas e suas respectivas concentrações.

Para a determinação do número de sub-bandas ocupadas N , manipulamos a equação 5.F: dado que $\sum_{i=1}^N n_i = n_s$, em que a concentração elétrons n_s é um dado inicial do cálculo, fazemos a somatória dessa equação, no índice i , resultando em $n_s = m^* / \pi \hbar^2 \left(N E_F - \sum_{i=1}^N E_i \right)$. Desse modo, a energia de Fermi será:

$$6. \quad E_F = \frac{1}{N} \left(\frac{\pi \hbar^2}{m^*} n_s + \sum_{i=1}^N E_i \right)$$

Dado que os níveis ocupados devem ter energia igual ou menor que a energia de Fermi, partimos inicialmente com $N = 1, 2, \dots$ até o valor máximo $N_{máx}$ para o qual $E_i \leq E_F, i = 1, 2, \dots, N_{máx}$, que é o numero de sub-bandas ocupadas desejado.

Nosso procedimento de cálculo foi o seguinte:

1. Escolha dos dados iniciais do cálculo: concentração de elétrons n_s e perfil de potencial da banda de condução ($V_{BC}(z)$);
2. Estipulação de uma densidade de elétrons por unidade de volume $n^{(0)}(z)$ arbitrária não nula (por exemplo, constante e de preferência baixa para evitar divergência nos cálculos) e escolha de concentrações iniciais para cada sub-banda $n_{s,i}^{(0)}$, por exemplo $n_{s,i}^{(0)} = 0$;
3. Determinação de $V_{ee}(z)$, r_s , $V_{ic}(z)$ e, portanto, $V(z)$ (equações 5.B-H-D-C);
4. Determinação de $\psi_i(z)$ e E_i (equação 5.A) (inicialmente escolhe-se um certo número de valores para i , e o programa por si só verifica posteriormente o valor correto de N);
5. Determinação de E_F , N e das concentrações das sub-bandas $n_i^{(1)}$ (equação 5.F e sua equivalente 6);

6. Normalização das autofunções $\psi_i(z)$ e determinação de $n^{(1)}(z)$ (equação 5.E);
7. Mistura de $n(z)$, através de $n^{(1)}(z) \leftarrow n^{(1)}(z) + c \left(\lambda \sum_{i=1}^N n_i^{(1)} + (1-\lambda) \sum_{i=1}^N n_i^{(0)} \right) \left| \psi_i(z) \right|^2$ e $n^{(1)}(z) \leftarrow \lambda n^{(1)}(z) + (1-\lambda) n^{(0)}(z)$, sendo c um número (vide item 9 abaixo) e $\lambda = 0,14$;
8. Integração de $n(z)$ para a obtenção de n_s e posterior comparação com o valor inicial;
9. Substituições $n^{(0)}(z) \leftarrow n^{(1)}(z)$ e $n_{s,i}^{(0)} \leftarrow n_{s,i}^{(1)}$ e repetição do ciclo iterativamente voltando ao item 3, aumentando c . Para um cálculo de I iterações, o valor de c para a i -ésima iteração foi $c = i/I$.

Seguindo esse algoritmo, conseguimos boa convergência para vários casos de PQW. Verificamos que misturas adequadas, como a que criamos e apresentamos no item 7, garantem melhor convergência do que outras – por exemplo, a mistura do potencial total antigo $V^{(0)}(z)$ e atual $V^{(1)}(z)$, como $V^{(1)}(z) \leftarrow \gamma V^{(1)}(z) + (1-\gamma) V^{(0)}(z)$ (sendo γ um número pequeno). A comparação entre nossos resultados com os de outros autores [25] mostra boa concordância.

Uma questão interessante é a variação da massa efetiva e da constante dielétrica ao longo do PQW. De fato, essas duas grandezas variam com a composição da liga x , e, portanto variam ao longo da coordenada z . Quanto à constante dielétrica, seu valor para a liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é dado por $\varepsilon = 12,90 - 2,84x$ [26], e em nosso trabalho consideramos o valor médio 12,87, empregado também por outros autores [27]. Quanto à massa efetiva, a variação com a composição de Al é maior do que a que ocorre com a constante dielétrica: $m^* = [0,063 + 0,083x]m_0$ [28]. A equação de Schrödinger que inclui a variação da massa efetiva é: $(-\frac{1}{2}\hbar^2 \partial_z m^*(z)^{-1} \partial_z + V(z))\psi_i(z) = E_i \psi_i(z)$ [29]. Desconsideramos ambas as variações, por terem pouca influência nos resultados [30]. Apenas para efeito de comparação, realizamos cálculos autoconsistentes com e sem variação espacial da massa efetiva para um PQW de 500 Å de largura (incluindo a variação espacial de m^* nas equações 5.A, 5.F e 5.I), e verificamos uma ligeira diferença entre os resultados, que não prejudica nossas conclusões.

Na figura 3 apresentamos, como referência, os resultados de cálculos autoconsistentes para um PQW com 500 Å de largura com $\Delta_1 = 147,5$ meV, $\Delta_2 = 88,7$ meV, e $n_s = 4,7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, na ausência de campo elétrico externo ($E = 0$). Nos cálculos,

inicialmente adotamos a massa efetiva $m^* = 0,0687m_0$ (valor igual à média ao longo da direção z , $\overline{m^*} = \int_{-250\text{Å}}^{250\text{Å}} m^* dz / 500\text{Å}$). Uma vez terminado o cálculo autoconsistente, recalculamos a massa efetiva como valor esperado, $\langle m^* \rangle = \int m^*(z) |\psi(z)|^2 dz$, obtendo $m^* = 0,064m_0$. A média desses dois valores é $m^* = 0,066m_0$, valor que empregamos para todos os nossos cálculos autoconsistentes neste trabalho, sendo igual ao adotado por Gwinn *et al.* [31] (Rimberg e Westervelt [32] empregaram o valor médio $0,0753m_0$, enquanto os trabalhos posteriores de Gwinn *et al.* e Hopkins *et al.* [33], do mesmo grupo de pesquisa, adotaram $0,067m_0$). O resultado do cálculo aponta a ocupação de duas sub-bandas, com concentrações $n_{s,1}=4,43 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ e $n_{s,2}=0,27 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$. Na figura 3, percebemos que o potencial autoconsistente (vermelho) é menos côncavo do que o potencial da banda de condução (preto), o que é causado por interações entre elétrons.

Figura 3 – Resultados de cálculos autoconsistentes para um PQW de 500Å e $n_s = 4,7 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$. Em preto, apresenta-se o perfil da banda de condução ($V_{BC}(z)$). Em azul e verde, a repulsão coulombiana ($V_{ee}(z)$) e a interação de troca e correlação ($V_{tc}(z)$), respectivamente, e em vermelho, o potencial autoconsistente final. A linha tracejada em preto dá a distribuição da densidade eletrônica.

3. Os efeitos Hall e Shubnikov-de Haas

O EFEITO HALL E O EFEITO HALL QUÂNTICO

O efeito Hall, descoberto por Edwin Herbert Hall em 1879 [34] é um fenômeno que ocorre no transporte de corrente elétrica quando esta é submetida a um campo magnético perpendicular ao seu movimento, em consequência da atuação de uma força de Lorentz. Esse fenômeno é ilustrado na figura 4. Daremos uma explicação simplificada mas suficiente com modelos clássicos, que também pode ser feita em termos da equação de Boltzmann para o transporte [35].

Figura 4 - Ilustração do efeito Hall. Um campo magnético B (seta azul) atuando sobre uma corrente elétrica I (seta cinza) à qual é perpendicular, causa o desvio da trajetória dos portadores devido à ação de uma força de Lorentz. Dependendo da natureza dos portadores associados a essa corrente (elétrons (e) ou buracos (h), cujas trajetórias são simbolizadas pelas setas verdes e vermelhas, respectivamente), surgirá uma diferença de potencial com sinal positivo ou negativo ao longo da direção perpendicular simultaneamente a I e a B . A extensão lateral do trecho por onde flui a corrente é designada por l .

Genericamente, tomando um campo magnético $\vec{B} = B\hat{k}$, uma carga q se deslocando com velocidade $\vec{v} = v\hat{i}$ sofrerá a ação de uma força de Lorentz $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B} = -qvB\hat{j}$. Assim, teremos um campo elétrico $\vec{E}_y = \vec{F} / q = -vB\hat{j}$ e, entre dois pontos ao longo do eixo y separados pela distancia l , uma diferença de potencial $V = E_y l = -vBl$.

Na figura 4, a corrente I se orienta na direção do eixo x positivo. Em metais ou semicondutores do tipo n , essa corrente corresponde ao movimento de elétrons de carga $q = -e$ que, seguindo convenção, se movimentam na direção $-x$ com velocidade média $\vec{v} = -v\hat{i}$. A força de Lorentz que atuará nos elétrons será (com $\vec{B} = B\hat{k}$):

$$7. \quad \vec{F} = -e(-\vec{v}) \times \vec{B} = -evB\hat{j}$$

Essa força corresponde a um campo elétrico $\vec{E}_y = -vB\hat{j}$ e a uma diferença de potencial V na direção y , dada por:

$$8. \quad V = E_y l = -vBl$$

onde l é a largura do canal de condução.

No caso de um semicondutor tipo p , inverte-se a carga e o sinal do vetor velocidade. Como consequência, a força de Lorentz tem o mesmo sentido que no caso de uma corrente de elétrons (y positivo). Entretanto, o sentido do campo elétrico E_y e o sinal da diferença de potencial se invertem. Essa mudança de sinal é um meio de determinação do tipo de portador na amostra. A diferença de potencial resultante pode gerar uma corrente, caso se faça um circuito fechado entre as laterais da barra representada na figura 4.

Define-se a resistência Hall R_H como a razão entre a diferença de potencial V e a corrente $I = en_s v l$, onde n_s é a concentração de portadores:

$$9. \quad R_H = \frac{V}{I} = -\frac{B}{en_s}$$

(ressaltemos que a corrente envolvida nessa expressão é a que flui ao longo da direção x).

A determinação experimental de R_H possibilita, portanto, conhecer a concentração de portadores n_s . Para casos simples em que há ocupação de apenas uma sub-banda, podemos obter a mobilidade μ – que é um importante parâmetro de

transporte definido como a razão entre o campo elétrico aplicado e a velocidade de arraste – a partir de n_s e da resistividade a campo zero ρ_0 , através de:

$$10. \quad \mu = \frac{1}{e\rho_0 n_s}.$$

Ressaltamos que, para sistemas de confinamento bidimensional como os que estudamos, a resistividade e a condutividade são tensores de segunda ordem, que simbolizaremos respectivamente por $\hat{\rho}$ e $\hat{\sigma}$, e são inter-relacionados através da expressão $\hat{\rho} = \hat{\sigma}^{-1}$, de modo que

$$11. \quad \rho_{xx} = \rho_{yy} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \quad ; \quad \rho_{xy} = \rho_{yx} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2},$$

sendo que $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, e $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$, valendo relações similares para as componentes de $\hat{\rho}$ em função das de $\hat{\sigma}$. Devido à natureza tensorial da resistividade, costuma-se designar as componentes ρ_{xx}, ρ_{yy} por *resistividades diagonais* (por serem componentes diagonais da matriz $\hat{\rho}$). Sob o ponto de vista geométrico, relacionam correntes e diferenças de potencial ao longo da mesma direção, de onde segue a outra denominação de *resistividades longitudinais, que adotaremos em nosso trabalho*. Em contrapartida, ρ_{xy}, ρ_{yx} relacionam diferenças de potencial e correntes transversas, de modo que são designadas *resistividades transversais* – ou também *resistividades Hall*, que adotaremos. Valem denominações semelhantes às *resistências*: resistência longitudinal e resistência Hall.

Entretanto, para campos magnéticos elevados, a equação 9 não descreve adequadamente os dados experimentais. A discrepância se deve à manifestação de outro fenômeno importante, o *efeito Hall quântico inteiro*, descoberto experimentalmente por Klitzing *et al.* em 1980 [36], que consiste no aparecimento de platôs sucessivos na curva da resistência diagonal R_{xx} , em função do campo magnético, dados por:

$$12. \quad R_H = \frac{1}{\nu} \frac{h}{e^2} = \frac{25812,807 \Omega}{\nu}$$

onde ν , denominado *fator de preenchimento*, assume valores inteiros positivos, $\nu = 1, 2, \dots$ (não confundir com o percentual de preenchimento de um PQW, definido na seção 1, página 9).

Para compreender o efeito Hall quântico, partimos da equação de Schrödinger para uma partícula num campo magnético, com autovalores de spin $s = \pm 1/2$:

$$13. \quad \left(\frac{1}{2m^*} (\vec{p} - e\vec{A}(\vec{r}))^2 + sg\mu_B B \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}),$$

onde $\vec{A}$ é o potencial vetor, e $\mu_B = e\hbar/2m_0$ é o magnéton de Bohr. O termo $sg\mu_B B = \pm \frac{1}{2}g\mu_B B$ corresponde ao desdobramento Zeeman de energia, causado pela interação do campo magnético externo com o spin eletrônico. Na presença de um campo magnético perpendicular à amostra $\vec{B} = B\hat{k}$, podemos escolher o calibre simétrico $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}$, e obtemos por separação de variáveis a equação de Schrödinger bidimensional:

$$14. \quad \frac{1}{2m^*} \left[(p_x - \frac{1}{2}eBy)^2 + (p_y - \frac{1}{2}eBx)^2 \pm \frac{1}{2}g\mu_B B \right] \psi(x, y) = E\psi(x, y)$$

Como resultado, teremos autovalores de energia dados por [37]:

$$15. \quad E_{n\uparrow,\downarrow}(B) = \hbar\omega_c (n + \frac{1}{2}) \pm \frac{1}{2}g\mu_B B,$$

onde $\omega_c = eB/m^*$ é a frequência de ciclotron, $n = 0, 1, 2, \dots$ é o índice do nível de Landau, e $\uparrow, \downarrow$ representam os estados de spin “up” e “down”, respectivamente. Essa equação mostra que, além do desdobramento de Zeeman, surge uma sucessão infinita de estados separados pela energia $\hbar\omega_c$, e que são denominados *níveis de Landau*. Esses níveis e seu espaçamento são proporcionais ao campo magnético.

A existência dos níveis de Landau é um dos fatores determinantes para a manifestação do efeito Hall quântico. Outro fator determinante é a existência de impurezas na amostra. Os platôs da resistência Hall (equação 12) ocorrem em coincidência com as regiões de campo magnético onde o nível de Fermi passa por um nível de Landau. Desse modo, o fator de preenchimento,

$$16. \quad \nu = \frac{n_s \hbar}{eB},$$

determina quantos níveis de Landau estão completamente cheios (abaixo da energia de Fermi). Paralelamente, nos valores de campo magnético em que ocorrem esses platôs em R_{xy} , a magnetorresistência (ou resistência longitudinal) R_{xx} se anula. A explicação para esse fato é simples: a uma dada temperatura, somente os elétrons da superfície de Fermi (cuja posição depende da concentração n_s) têm mobilidade, e, portanto podem contribuir para a condução de corrente elétrica. Entretanto, a condução só é possível quando o nível de Fermi coincide com algum dos níveis de energia E_n . Desse modo, a

componente σ_{xx} do tensor condutividade $\hat{\sigma}$ se anula fora dessas coincidências, e a resistividade longitudinal ρ_{xx} também, já que

$$17. \quad \rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \therefore \rho_{xx} = \sigma_{xx} = 0.$$

Desse modo, ρ_{xx} apresenta um comportamento oscilatório. Notemos que, dessas considerações, resulta o fato de que os zeros da resistividade longitudinal são igualmente *periódicos em $1/B$, com frequência*

$$18. \quad \Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{e(\nu+1)}{hn_s} - \frac{e\nu}{hn_s} = \frac{e}{hn_s}.$$

Dessa expressão se extrai experimentalmente o valor da concentração n_s .

O efeito Hall quântico inteiro, com a ocorrência de platôs na resistividade Hall e zeros na resistividade diagonal, é claramente observado nas amostras que estudamos, em baixas temperaturas.

Em nosso trabalho, apenas o efeito Hall *ordinário* foi objeto de estudo. Em contrapartida, o efeito Hall *quântico* foi para nós uma ferramenta, com a qual, através da expressão 18, determinamos em vários casos a concentração de elétrons em nossas amostras.

O EFEITO SHUBNIKOV-DE HASS

Se a resistividade longitudinal apresenta zeros em valores periódicos na variável $1/B$, isso entretanto não ocorre em todo o domínio de valores de campo. Para valores altos de campo, temos o efeito Hall quântico com todas as suas conseqüências citadas na seção anterior. Porém, para campos muito baixos, temos um comportamento semiclássico em que a magnetorresistencia não apresenta oscilações [38]. Esse comportamento ocorre quando o período de uma órbita ciclotrônica é muito maior do que o tempo de espalhamento dos elétrons τ_q – chamado tempo quântico [39] –, isto é, $\omega_c \tau_q \ll 1$, onde $\omega_c = eB/m^*$ é a frequência de ciclotron. Num paralelo clássico, o elétron não consegue descrever uma órbita ciclotrônica completa entre duas colisões. Entretanto, no meio termo entre o comportamento semiclássico e a região de manifestação do efeito Hall quântico, temos um terceiro comportamento peculiar, na

região em que $\omega_c \tau_q \gg 1$. Surge um comportamento oscilatório muito regular, também de frequência $\Delta(1/B) = (e/h)/n_s$ (como expresso pela equação 18), mas sem que a resistividade longitudinal se anule. No regime de $\Delta\rho_{xx}/\rho_{xx} \ll 1$ e para a ocupação de apenas uma sub-banda [40],

$$\begin{aligned} \mathbf{19.} \quad \frac{\Delta\rho_{xx}}{\rho_{xx}} &\propto \frac{2\pi^2 kT / \hbar\omega_c}{\sinh(2\pi^2 kT / \hbar\omega_c)} \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c \tau_q}\right) \cos\left(\frac{2\pi E_F}{\hbar\omega_c} + \phi\right), \text{ ou seja,} \\ \rho_{xx}(B) &= A \frac{2\pi^2 kT / \hbar\omega_c}{\sinh(2\pi^2 kT / \hbar\omega_c)} \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c \tau_q}\right) \cos\left(\frac{2\pi E_F}{\hbar\omega_c} + \phi\right) + \rho_{xx}(0) \end{aligned}$$

onde ϕ é uma fase, T a temperatura e k a constante de Boltzmann. Essa expressão é denominada *fórmula de Lifshitz-Kosevich*, e o efeito oscilatório da resistividade (determinado pela função cosseno), é denominado *Shubnikov-de Haas*.

Segundo algumas referências, $\phi = -\pi$ para confinamento bidimensional [41] entretanto, há autores que considerem $\phi = +\pi/2$ [42] ou mesmo $\phi = 0$ [43,44]. Com respeito à amplitude A , na referência [44], $A = 4$. Em nossas simulações numéricas, consideramos tanto a fase quanto a amplitude como arbitrárias.

Pelo ajuste matemático dessa função com medidas experimentais das oscilações de Shubnikov-de Haas, podemos extrair não só o tempo quântico, como também a massa efetiva e a concentração, caso que em particular nos interessa: isso se consegue determinando experimentalmente o argumento da função cosseno na expressão 15, pois $n_s = (m^* / \pi \hbar^2) E_F$. Em outras palavras: o intervalo completo entre duas oscilações sucessivas significará um período de 2π , para o qual

$$\mathbf{20.} \quad \frac{2\pi E_F m^*}{\hbar e} \frac{1}{B_1} - \frac{2\pi E_F m^*}{\hbar e} \frac{1}{B_2} = 2\pi.$$

Dessa igualdade, obtemos simplesmente:

$$\mathbf{21.} \quad n_s = \frac{2e}{h\Delta(1/B)},$$

onde $\Delta(1/B) = 1/B_1 - 1/B_2$ é o período de oscilação já mencionado.

Comparando as expressões 16 e 20, encontramos $\Delta\nu = 2$, o que significa o preenchimento de um nível de Landau com a degenerescência de dois estados de spin. Se B é dado em tesla e desejamos obter a concentração n_s em unidades de cm^{-2} , basta usar a fórmula:

$$22. \quad n_s = \frac{4,835 \times 10^{10}}{\Delta(1/B)}.$$

No caso de ocupação de mais de uma sub-banda, a fórmula torna-se mais complexa, envolvendo as concentrações e tempos quânticos correspondentes. Soma-se expressões iguais à equação 19 para cada sub-banda i ocupada [44]:

$$23. \quad \rho_{xx}(B) = \sum_{i=1}^N A_i \frac{2\pi^2 kT / \hbar \omega_{c,i}}{\sinh(2\pi^2 kT / \hbar \omega_{c,i})} \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_{c,i} \tau_{q,i}}\right) \cos\left(\frac{2\pi E_{F,i}}{\hbar \omega_c} + \phi_i\right) + \rho_{xx}(0)$$

onde se distingue genericamente a massa efetiva de cada sub-banda em $\omega_{c,i} = \frac{eB}{m_i^*}$.

OSCILAÇÕES DA MAGNETORRESISTÊNCIA A CAMPO ALTO

Voltemos a considerar as regiões de campo magnético alto, em que se manifesta o efeito Hall quântico acompanhado do comportamento oscilatório da resistividade longitudinal – a qual se anula em fatores de preenchimento inteiros. Existe um formalismo em que os efeitos de espalhamento são considerados na aproximação de Born (*self-consistent Born approximation*) [45] e os oriundos do alargamento de níveis são tratados autoconsistentemente. Como resultado, a densidade de estados de cada nível de Landau tem forma de uma semi-elipse, e a densidade de estados total é $D(E) = 2eB / \pi \hbar \sum_{n=0}^{\infty} \left[1 - (E - E_n)^2 / \Gamma_n^2\right]^{1/2}$, onde os parâmetros de alargamento Γ_n são iguais para centros espalhadores de curto alcance (alcance menor do que $l / \sqrt{2n+1}$, onde $l = \sqrt{\hbar / eB}$ é o comprimento magnético, que é igual a 80Å para $B = 10$ T). Pela formula de Kubo [46], a condutividade longitudinal à temperatura zero é dada por [47]:

$$24. \quad \sigma_{xx} = e^2 / \pi^2 \hbar \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \left[1 - (E - E_n)^2 / \Gamma_n^2\right].$$

Entretanto, a campos elevados, a densidade de estados fora das regiões de semi-elipses se anula, o que não é conveniente para uma análise detalhada de espectros de condutividade. Correções adicionais levam a uma solução intermediária entre a semi-elipse e uma gaussiana. Cálculos de Gerhardtts [48] na chamada aproximação cumulante de ordem inferior (*lowest order cumulant approximation*), prevêm a forma gaussiana para a densidade de estados, isto é,

$$25. \quad D(E, B) = \frac{eB}{h} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\Gamma(B)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-2\left\{\frac{E-E_{n\uparrow}(B)}{\Gamma(B)}\right\}^2} + e^{-2\left\{\frac{E-E_{n\downarrow}(B)}{\Gamma(B)}\right\}^2} \right),$$

onde $\Gamma(B)$ é o parâmetro de alargamento. Os picos da densidade de estados ocorrem nas energias $E_{n\uparrow,\downarrow} = \hbar\omega_c[n+1/2] \pm \frac{1}{2}g\mu_B B$, as quais correspondem a níveis de Landau sucessivos ($n=0,1,2,\dots$) desdobrados nos estados de spin ($\uparrow, \downarrow$). Os picos de desdobramento de spin ocorrem em fatores de preenchimento semi-inteiros, dados por $\nu = (2N+1) - \frac{1}{2}$ e $\nu = (2N+1) + \frac{1}{2}$, e o mínimo entre eles ocorre aproximadamente (tão mais aproximadamente quanto menor o alargamento $\Gamma(B)$) no fator de preenchimento ímpar $\nu = 2N+1$.

Quanto ao parâmetro de alargamento, em certas teorias auto-consistentes em campos elevados, é tomado como a média geométrica da energia de ciclotron $\hbar\omega_c$ e de

$$26. \quad \Gamma = \hbar / \tau_q,$$

o que resulta em $\sqrt{\hbar^2 eB / (m^* \tau_q)}$, e representa uma dependência com o campo magnético da forma $\sqrt{B}$. Na aproximação auto-consistente de Born, a expressão é ligeiramente diferente, $\Gamma(B) = \sqrt{2\hbar^2 eB / (\pi m^* \tau_q)}$. Preferiremos adotar a definição mais atual, segundo a equação 26 [49].

A essa densidade de estados está associada uma condutividade [50]

$$27. \quad \sigma_{xx}(B) = \frac{e^2}{h} \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} \right) \left(e^{-4\left\{\frac{E_F - E_{n\uparrow}(B)}{\Gamma(B)}\right\}^2} + e^{-4\left\{\frac{E_F - E_{n\downarrow}(B)}{\Gamma(B)}\right\}^2} \right)$$

Com essa expressão, podemos determinar a resistividade longitudinal ρ_{xx} através da equação 17. Para isso, necessitamos também da componente Hall da condutividade, σ_{xy} . Desprezamos, por aproximação, o efeito Hall quântico, tomando assim para a condutividade Hall a expressão clássica $\sigma_{xy}(B) = -n_s e / B$ [51]. Para ilustrar esse resultado, na figura 5.a exibimos o gráfico da resistividade longitudinal (calculada) do mesmo PQW com 500 Å de largura e $n_s = 4,7 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ para o qual realizamos os cálculos autoconsistentes na seção 2 deste capítulo. Nesse gráfico, entretanto, o ajuste subentende a ocupação de apenas uma sub-banda, por aproximação

(já que $n_{s,1} \gg n_{s,2}$). Em conjunto, apresentamos também o resultado de uma medida de Shubnikov-de Haas a 1,6 K de uma de nossas amostras com essas características. Podemos notar uma grande semelhança entre as oscilações de ambas as curvas. No ajuste, encontramos $\tau_q \sim 0,2-0,3$ ps e $n_s = 4,75 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$. Para a massa efetiva usamos $m^* = 0,066m_0$. Para o fator g de Landé foi necessário usar a expressão de ajuste $g = 0,3984 + 1,6B^{0,8}$ (na verdade, previsões teóricas afirmam que $g = g_1 + aB$, onde g_1 é constante e aB é associado a efeitos de muitos corpos, conforme veremos posteriormente,). Não obstante a divergência do número de sub-bandas ocupadas entre o cálculo autoconsistente e o ajuste da curva da magnetorresistividade, há grande semelhança entre os resultados. Na figura 5.b, comparamos o mesmo resultado experimental na região de campos baixos com um ajuste da fórmula de Lifshitz-Kosevich, equação 19. Desse ajuste obtemos um tempo bem próximo ao anterior, $\tau_q = 0,3$ ps. Com respeito à concentração de elétrons, obtemos $n_s = 5,6 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, o que difere em 16%. Essa diferença, na verdade, advém de uma limitação experimental do equipamento (tempo de integração do sinal e taxa de variação temporal do campo magnético durante a medida). Ela é perceptível na região de campo baixo – onde se estuda as oscilações de Shubnikov-de Haas – onde a variação do campo é mais rápida, e pode ser reduzida variando as condições de medida (reduzindo o tempo de integração e/ou a variação temporal do campo).

Figura 5 – a) Gráfico da resistividade obtida através das equações 17 e 27 (em vermelho) comparada com o resultado de uma medida de Shubnikov-de Haas para uma amostra de PQW, à temperatura de 1,6 K (preto). b) Comparação do mesmo resultado experimental (preto) na região de baixo campo com o ajuste da fórmula de Lifshitz-Kosevich equação 19 (em vermelho).

Uma característica essencial desse comportamento oscilatório da magnetorresistividade é que, à medida que o campo magnético aumenta, a magnetorresistividade apresenta um máximo toda vez que um nível de Landau (mas especificamente, um de seus desdobramentos de spin) passa pelo nível de Fermi, ou seja, quando for satisfeita a relação $[(n + 1/2) \pm 1/4 g] \hbar e / m^* B = E_F$.

Na verdade, numa outra aproximação pode-se considerar a variação da energia de Fermi com o campo magnético [51], o que altera não só a expressão para a densidade de estados $D(B)$ como a condutividade $\sigma_{xx}(B)$. Nesse sentido, é mais correto substituir E_F por $E_F(B)$ na expressão acima. A inclusão dessa dependência gera de fato algumas alterações no resultado, especialmente na forma dos picos e na dependência das energias de desdobramento de spin dos níveis de Landau.

Outro fator crucial é a temperatura. As considerações acima dizem respeito ao caso ideal de temperatura zero, mas em condições reais de temperatura não nula a densidade de estados e a condutividade devem ser calculadas segundo a média estatística. A expressão da condutividade envolvendo a dependência com a temperatura, em região de temperaturas baixas onde o potencial químico μ pode ser substituído pela energia de Fermi, é dada por

$$28. \quad \sigma_{xx}(B, T) = \int_{-\infty}^{E_F(B)} \left(\frac{\partial f(\varepsilon, T)}{\partial \varepsilon} \right) \sigma_{xx}(B, \varepsilon) d\varepsilon$$

onde $f(\varepsilon, T) = [e^{-(\varepsilon - E_F)/kT} + 1]^{-1}$ é a distribuição de Fermi, e

$$29. \quad \sigma_{xx}(B, \varepsilon) = \frac{e^2}{h} \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} \right) \left(e^{-4 \left\{ \frac{\varepsilon - E_{n\uparrow}(B)}{\Gamma(B)} \right\}^2} + e^{-4 \left\{ \frac{\varepsilon - E_{n\downarrow}(B)}{\Gamma(B)} \right\}^2} \right)$$

(expressão idêntica à expressão 27, com a troca de E_F pela variável ε).

Na figura 6 apresentamos os espectros de medidas de Shubnikov-de Haas de amostras de PQW de 500 Å a temperaturas distintas, 50 mK (em preto) e 1,6 K (em vermelho). Apesar de apresentarem uma ligeira diferença de concentrações eletrônicas (da ordem de 5%) que faz com que os picos não ocorram nos mesmos valores de campo, ambas as amostras foram crescidas em um mesmo “*waffer*” de GaAs (e posteriormente cortadas dele), e possuem propriedades semelhantes. Na figura, linhas pontilhadas em azul mostram a correspondência entre os picos de cada um dos espectros. Os pares de picos rotulados por “A” e “B” são claramente visíveis em ambos os espectros, enquanto que os pares “C” e “D” só são resolvidos no espectro à temperatura menor. Nesse mesmo espectro, já o par “E” e seguintes não são resolvidos em nenhum caso. A medida a 50 mK nos revela uma mobilidade $\mu_{50\text{mK}} = 700000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, enquanto que a medida a 1,6 K dá $\mu_{1,6\text{K}} = 560000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$. Esse aumento na mobilidade com a redução da temperatura significa um aumento no tempo de transporte $\tau_t = \mu m^*/e$, e por conseguinte também um aumento no tempo quântico τ_q , com o qual é relacionado, o que se reflete no parâmetro de alargamento Γ , equação 26. Esse fato explica porque os picos à temperatura de 50 mK são estreitos, permitindo a visualização dos desdobramentos, enquanto que à 1,6 K são bem mais alargados.

Figura 6 – Medidas de Shubnikov-de Haas de duas amostras de PQW de 500 Å extraídas de um mesmo *waffer*, a temperaturas distintas: 50 mK (preto) e 1,6 K (vermelho). As linhas tracejadas em azul marcam as correspondências entre os picos de ambos os espectros.

4. O fator g de Landé em AlGaAs

Atualmente, tem-se dado especial atenção ao estudo do fator g de Landé em semicondutores, com o objetivo da aplicação prática, em especial na spintrônica. Para o elétron livre $g = 2,0023$, mas em sólidos o fator g assume valor diferente. Para semicondutores, o modelo de 5 níveis na teoria $\vec{k} \cdot \vec{p}$ [52] dá uma previsão do valor de g em função dos parâmetros de bandas do semicondutor. Em sistemas *bulk* (na ausência de confinamento espacial), o fator g previsto é dado pela expressão [53]

$$30. \quad g_{\vec{k}, \vec{p}} = 2 + C + \frac{2}{3} \left[E_{P0} \left(\frac{1}{\varepsilon_0} - \frac{1}{f_0} \right) + E_{P1} \left(\frac{1}{f_1} - \frac{1}{\varepsilon_1} \right) - \frac{2\Delta \sqrt{E_{P0} E_{P1}}}{3} \left(\frac{2}{\varepsilon_1 f_0} + \frac{1}{\varepsilon_0 f_1} \right) \right]$$

Nessa expressão, C' é um termo oriundo de contribuições de bandas distantes (*far band contribution*); Δ é a energia de spin-órbita inter-bandas; $E_{P_{0(1)}} = 2m_0P_{0(1)}^2 / \hbar^2$ são energias dadas em função de elementos de matriz de momento inter-sub-bandas $P_{0(1)}$; $f_{0(1)} = \varepsilon_{0(1)} + \Delta_{0(1)}$, e as grandezas $\varepsilon_{0(1)}$ e $\Delta_{0(1)}$ são parâmetros de bandas. Para ligas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, que são o material das nossas amostras, essas grandezas assumem os seguintes valores em eV, em função do conteúdo x de Al na liga:

$$31. \quad \begin{cases} \varepsilon_0(x) = -(1,5194 + 1,36x + 0,22x^2) & f_0(x) = -(1,8594 + 1,229x + 0,291x^2) \\ \varepsilon_1(x) = 2,969 + 0,971x & f_1(x) = 3,14 + 0,98x \\ E_{P_0} = 27,86 & \Delta = -0,061 \\ E_{P_1} = 2,36 \end{cases}$$

O parâmetro C' também varia com x . Entretanto, a comparação de resultados experimentais com a equação 30 mostra que seu valor é desprezível. Desse modo, a contribuição principal advém dos 5 níveis considerados pela teoria, e podemos desconsiderar C' . Os resultados experimentais obtidos por Weisbuch e Hermann [54] à temperatura de 4 K prevêm uma dependência empírica

$$32. \quad g_{WH}(x) = -0,44 + 4,25x - 3,9x^2.$$

Na figura 7 exibimos um gráfico comparativo dos resultados teóricos e experimentais segundo as equações 30 (ajustando o parâmetro $C' = -0,05$) e 32, na faixa de $x = 0$ a $x = 31\%$, que corresponde à de nossas amostras de poços parabólicos. Podemos notar uma boa concordância entre ambos os resultados.

Figura 7 – Comparação de valores para o fator g calculados em função da concentração x de Al pela teoria $\vec{k} \cdot \vec{p}$ no modelo de 5 bandas (em preto) e pela fórmula empírica de Weisbuch e Hermann (em vermelho).

5. O *gap* de spin e a contribuição de efeitos de muitos corpos

Desde as primeiras observações do efeito Shubnikov-de Haas em 1966, os desdobramentos de Zeeman aparentaram na prática serem muito maiores do que o esperado, o que se interpretou como uma consequência de uma mudança no fator g , levando à idéia de que este tenha uma contribuição adicional. Na verdade, além da contribuição do efeito de bandas citado, existe um fator adicional oriundo de interações de muitos corpos. Se definirmos o *gap* de energia de Zeeman como a diferença de energia entre dois estados de spin “up” e “down” associados a um mesmo nível de Landau, isto é, $+\frac{1}{2}|g_0|\mu_B B - (-\frac{1}{2})|g_0|\mu_B B = |g_0|\mu_B B$, o *gap* total de spin Δ_s deve ser expresso como:

$$33. \quad \Delta_s = |g_0|\mu_B B + E_{tr} = g^* \mu_B B$$

onde g^* é o fator g total, g_0 o fator g de bandas (*bare g factor*) calculado através da equação 30 (e que para $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é aproximadamente dado pela equação 32) e E_{tr} é a

energia de interação de troca [55], definida como a energia necessária para a criação de um nível de Landau de um par de um elétron com spin “down” e de um buraco com spin “up” muito separados. Essa contribuição foi proposta pela primeira vez por Janak [56] para explicar o valor relativamente elevado do fator g em transistores MOS (*Metal Oxide Semiconductor*), em relação ao esperado $g = 2$, e estudada por uma série de autores, destacando-se o trabalho de Ando e Uemura [57], que concluíram que o fator g deveria ser uma função oscilatória do preenchimento dos níveis de Landau.

Normalmente, a contribuição E_{tr} excede o *gap* de Zeeman $\frac{1}{2}g_0\mu_B B - (-\frac{1}{2}g_0\mu_B B) = |g_0|\mu_B B$. Em GaAs, por exemplo, a razão entre essas grandezas é da ordem de 20 [58]. Medidas de E_{tr} não tem sucesso por técnicas ópticas, uma vez que as transições radiativas entre estados de spin não devem ser influenciadas por interações entre elétrons. Medidas de ressonância de spin eletrônico (ESR, *Electron Spin Resonance*) só são hábeis em fornecer o valor de g_0 . A separação de E_{tr} da contribuição de bandas $\pm \frac{1}{2}g_0\mu_B B$ pode ser feita via medidas de transporte com inclinação gradual da amostra, conforme explicaremos mais adiante.

A questão da dependência do *gap* de spin Δ_s com respeito ao campo magnético é um tanto controversa. Segundo Nicholas *et al.* [59], a campos baixos a contribuição de troca é proporcional ao desdobramento Zeeman $|g_0|\mu_B B$, o que implica que tanto E_{tc} quanto Δ_s são proporcionais ao campo, ao passo que a campos altos, E_{tc} satura simultaneamente com os estados de spin.

Teorias simples de muitos corpos, que tomam para a separação média dos elétrons o comprimento magnético $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$, prevêm que a interação coulombiana entre os elétrons $E_c = e^2/4\pi\epsilon_0 l_B$ deve variar com $\sqrt{B}$, de onde segue também que $\Delta_s \sim \sqrt{B}$. Entretanto, isso só é válido quando há apenas um nível de Landau ocupado, e a interação coulombiana é pequena em comparação com a energia de cíclotron $\hbar\omega_c$. Quando há muitos níveis ocupados nenhuma dessas condições é satisfeita: $E_c > \hbar\omega_c$ e somente $1/v$ dos elétrons contribuem para a energia de troca, já que os restantes se localizam nos outros níveis de Landau que estão cheios. Em acréscimo, o parâmetro de distância característico para a interação de troca deixa de ser o comprimento magnético para ser o vetor de onda de Fermi k_F . Desse modo pode-se escrever a energia de troca como:

$$34. \quad E_{tr} \sim \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{k_F}{v}.$$

Dada a dependência de v com o campo magnético (equação 16), segue que a expressão acima pode ser escrita como:

$$35. \quad E_{tr} = \alpha \hbar \omega_c,$$

onde α é uma constante, prevendo uma dependência linear.

Aleiner e Glazmann [60], usando um método mais sofisticado, mostraram que E_{tc} varia linearmente com o campo magnético no limite de v grande, e deduziram a seguinte expressão para a constante α :

$$36. \quad \alpha = \frac{\ln(2k_F a_B)}{\pi k_F a_B},$$

que, portanto, varia com a concentração através de k_F , já que $k_F a_B = 0,79\sqrt{n_s}$ (no sistema MKS). Para $n_s = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, encontramos $\alpha = 0,18$.

De fato, medidas sugerem que o *gap* de spin varia linearmente com o campo [61]. As expressões 33 e 35 implicam assim que g^* é uma constante.

Para um gás bidimensional de elétrons, a contribuição de troca depende apenas da componente do campo normal ao plano do gás [62]. Nesse sentido, escrevemos

$$37. \quad \Delta_s = |g_0| \mu_B B + \frac{\alpha \hbar e}{m^*} B_{\perp}$$

Em outras palavras,

$$38. \quad \Delta_s = |g_0| \mu_B B + \frac{\alpha \hbar e}{m^*} B \cos \theta$$

ou seja, o fator g total g^* é

$$39. \quad g^* = |g_0| + 2\alpha \frac{m_0}{m^*} \cos \theta,$$

que depende da inclinação do campo magnético.

Essas considerações nos habilitam a modificar ligeiramente a expressão para os níveis de Landau desdobrados pelo spin, manifesta pela equação 15

$$40. \quad E_{n\downarrow,\uparrow}(B, \theta) = E_n \pm s g^* \mu_B B = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar e B \cos \theta}{m^*} \pm \frac{1}{2} g_0 \mu_B B \pm \frac{1}{2} \frac{\alpha \hbar e}{m^*} B \cos \theta$$

$n - \text{ésimo}$ *Zeeman* *troca*
nível de Landau

Como explicitado, o primeiro termo do último membro da expressão representa os níveis de Landau. O segundo, a energia de Zeeman associada ao fator de bandas g_0 . E o terceiro, a energia de Zeeman associada à contribuição de troca.

Na verdade, o termo referente aos níveis de Landau tem uma dependência funcional em relação ao ângulo θ mais complexa para sistemas confinados. É necessário reescrever a equação de Schrödinger (equação 14) considerando $\vec{B} = (B_x, 0, B_z)$, e incluímos também o potencial parabólico (aliás, tomando um potencial “efetivo” por aproximação, já que as interações entre elétrons também tem papel importante): $V(z) = az^2 = \frac{1}{2}m^* \Omega^2 z^2$. No calibre $\vec{A}(z) = (-yB_x, 0, yB_x)$ [63], obtém-se

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_\varphi$$

onde

$$\omega_\varphi = \sqrt{\omega_c^2 \cos(\varphi)^2 + \Omega^2 \sin(\varphi)^2 - \omega_c \Omega \sin(2\varphi) \sin(\theta)}$$

e φ é dado por

$$\varphi = \frac{1}{2} \arctg \left(\frac{2\omega_c \Omega \sin(\theta)}{\Omega^2 - \omega_c^2} \right)$$

Entretanto, verificamos que na prática a expressão 40 é suficiente e dispensa as complicações dessa formulação mais complexa.

6. O colapso do *gap* de spin

Segundo Fogler e Shklovskii [64], o *gap* de spin Δ_s sofre colapso para fatores de preenchimento acima de um certo valor, devido à destruição do termo de troca E_{tc} pela desordem. Vimos na seção 3 que os picos de desdobramento de spin ocorrem em fatores de preenchimento semi-inteiros, $\nu = (2N + 1) - \frac{1}{2}$ e $\nu = (2N + 1) + \frac{1}{2}$, de modo que a distância entre ambos corresponde a um intervalo $\delta\nu = 1$. Experimentalmente, entretanto, para fatores de preenchimento elevados (campos magnéticos baixos), os picos surgem em $\nu = (2N + 1) \pm \frac{1}{2} \delta\nu$, com $\delta\nu < 1$. Fogler e Shklovskii mostram que, para uma energia de Zeeman $|g_0| \mu_B B$ nula, existe um dado fator de preenchimento crítico ν_c , ou em outras palavras, um N crítico, $N = N_c$ (tal que $\nu_c = 2N_c + 1$), em que o

espaçamento δv cai a zero, o que significa que os dois picos de spin se fundem. Por uma teoria de campo médio, mostram que, nesse colapso, δv sofre uma transição de fase de segunda ordem em função do campo magnético, e que, para heteroestruturas de alta mobilidade, N_c depende diretamente da densidade de dopagem remota doadora n_i , da densidade do gás bidimensional de elétrons n_s e do *spacer* d segundo a relação $N_c = 0,9 d n_s^{5/6} n_i^{-1/3}$, e para amostras de baixa mobilidade, $N_c \propto n_s \mu$. Para $|g_0| \mu_B B$ não nulo, a transição é um tanto mascarada, mas, para todos os efeitos, o elevado valor de E_{tr} em relação a $|g_0| \mu_B B$ aproxima bem essas considerações da realidade. Podemos concluir, de um modo geral, que *o desdobramento de spin dos picos da condutividade associado à contribuição de troca é determinado pela competição entre efeitos de desordem e de interação entre elétrons.*

Em campos elevados, as oscilações da magnetorresistividade apresentam claramente picos separados de desdobramento de spin, e os máximos aparecem em fatores de preenchimento semi-inteiros. Já na região de campos baixos, o desdobramento dos picos não é resolvido. Sob esse aspecto, existe uma diferença marcante entre os picos de desdobramento de spin e os picos não desdobrados a campo baixo (que nada mais são do que picos de spin sobrepostos), que distingue o colapso do *gap* de spin de um simples efeito “mascaramento” dos pares de picos resultante da quase sobreposição matemática. Para isso, recorreremos à expressão 19 (fórmula Lifshitz-Kosevich). Essa expressão mostra que, à medida que o campo é reduzido, o fator de amortecimento $\exp(-\pi/\omega_c \tau_q)$ diminui a amplitude das oscilações progressivamente. Esse amortecimento é acentuado a temperaturas mais elevadas pelo coeficiente

$$\frac{2\pi^2 kT / \hbar \omega_c}{\sinh(2\pi^2 kT / \hbar \omega_c)}.$$

Num certo limite de campo, a amplitude torna-se tão pequena que

quase não se consegue distinguir as oscilações da magnetorresistividade, as quais podem se confundir com o ruído associado a medidas. Leadley *et al.* [65] relatam ter chegado a perceber oscilações correspondentes a fatores de preenchimento acima de 100 ou até superior a 150, em certos casos – tomando a precaução de obter bancos de dados de medidas com considerável quantidade de pontos e cuidadosa variação do campo magnético. Em suma, a experiência revela que as oscilações persistem indefinidamente por menor que seja o campo, só perdendo amplitude.

Por outro lado, a progressão do colapso dos picos de spin com a diminuição do campo tem uma característica bem diferente. Poder-se-ia acreditar num comportamento análogo ao das oscilações da magnetorresistividade a baixo campo, a saber, que a separação dos picos de spin diminuísse indefinidamente e que, se se tivesse condições de realizar medidas com precisão e volume de dados cada vez maior, sempre se poderia distinguir os dois picos de spin em campos arbitrariamente pequenos. Em outras palavras, ter-se-ia a capacidade de identificar um ponto de mínimo relativo correspondente a fatores de preenchimento ímpares (que correspondem ao ponto intermediário entre dois picos de spin). Entretanto, Leadley *et al.* [65] revelam que, independentemente da qualidade das condições experimentais, existe um valor de campo magnético finito em que ambos os picos de spin (correspondentes a um mesmo nível de Landau) convergem. Isso é um sinal de que o *colapso é crítico, indicativo de uma mudança de fase de segunda ordem quando a interação de troca desaparece*.

Wong *et al.* [66] realizaram um estudo da influência da concentração, e constataram que para cada nível de Landau N (relacionado ao fator de preenchimento por $\nu = 2N + 1$) existe uma concentração crítica n_c abaixo da qual o desdobramento desaparece, e que, em primeira ordem, $n_c \propto N$.

Leadley *et al.*, investigando o comportamento de $\delta\nu$ em função da temperatura T para diversos fatores de preenchimento em diversas amostras, constataram que todos os pontos experimentais parecem seguir a mesma dependência funcional com respeito à variável $(T - T_{\delta\nu=0,5})/T_0$, onde $T_{\delta\nu=0,5}$ é a temperatura em que $\delta\nu = 0,5$, e T_0 é um parâmetro de temperatura obtido para cada amostra por um ajuste numérico. Em acréscimo, verificaram que T_0 segue uma dependência linear com $1/\tau_q$, que é proporcional ao potencial de impurezas $\hbar/\tau_q$ originário do alargamento Γ das oscilações de Shubnikov-de Haas (equação 19). Desse modo, propõem que esse potencial tem influência marcante sobre o gap de spin, e que o gap de spin *colapsa quando a separação entre os níveis de spin for menor do que o alargamento (potencial de desordem)*:

$$41. \quad g^* \mu_B B (= \Delta_s) = \frac{\hbar}{\tau_q}.$$

Apenas comentaremos que Leadley *et al.* [65] propõem uma relação empírica entre o fator de preenchimento crítico ν_c e a temperatura, $\nu_c(T)^{-1} = \nu_c(0)^{-1} + cT$, onde c

é um parâmetro. Dessa equação, em conjunto com a equação 33, deduzem que $g^* \mu_B B = \hbar/\tau_q + MkT$, onde M é uma constante numérica.

Para o caso de medidas com variação do ângulo de inclinação do campo, igualamos as equações 38 e 41, obtendo assim

$$42. \quad |g_0| \mu_B B + \frac{\alpha \hbar e}{m^*} \cos \theta B = \frac{\hbar}{\tau_q}$$

que, após manipulação algébrica, se converte em

$$43. \quad \frac{m_0}{Be \tau_q} \cos \theta^{-1} = \frac{|g_0|}{2} \cos \theta^{-1} + \frac{m_0}{m^*} \alpha$$

ou ainda

$$44. \quad \frac{\Delta_s}{\hbar \omega_c} \frac{m_0}{m^*} = \frac{|g_0|}{2} \cos \theta^{-1} + \frac{m_0}{m^*} \alpha$$

onde $\omega_c = \frac{eB \cos \theta}{m^*}$. A expressão 44 é essencial em nosso trabalho, na determinação experimental de g_0 que apresentaremos no capítulo 3.

Capítulo 2

Estrutura e propriedades básicas
das amostras estudadas, e
equipamentos de medida

1. Plano do crescimento das amostras

As amostras estudadas – todas elas contendo PQW – foram crescidas sobre substratos de GaAs (001) por epitaxia de feixe molecular (MBE, *Molecular Beam Epitaxy*) no Laboratório de Novos Materiais Semicondutores do Instituto de Física da Universidade de São Paulo e no *Institute of Semiconductor Physics* (Novosibirsk Rússia) (apenas a amostra AG662), uma técnica que já foi extensivamente empregada em nosso grupo e foi bem descrita em inúmeros trabalhos, razão pelo que nos absteremos de explicá-la [67]. O esquema completo do crescimento das amostras seguiu as seguintes etapas:

1. Crescimento de um *buffer* de 1 μm de GaAs sobre o substrato de GaAs, para a obtenção de uma superfície de alta qualidade cristalina, livre dos defeitos do substrato; após os primeiros 2000 Å, cresceu-se uma super-rede de AlAs/GaAs, para a contenção das impurezas do substrato;
2. Crescimento de uma rampa com concentração de Al variando linearmente de zero até 30%, com largura de 500 Å;
3. Crescimento de uma liga uniforme com 31% de Al, com 1000 Å;
4. Crescimento da camada de dopagem delta e de um *spacer*;
5. Crescimento do PQW com parâmetros de acordo com o desejado;
6. Crescimento do segundo *spacer* e da segunda camada de dopagem delta (em posição simétrica ao *spacer* anterior em relação ao PQW);
7. Crescimento de uma camada de AlGaAs com 31% de Al, com 400 Å;
8. Crescimento de uma camada de dopagem delta de Si, cuja finalidade é a de neutralizar as cargas da superfície da amostra, resultante de ligações livres (*dangling bonds*);
9. Crescimento de uma camada de GaAs de 100 Å, para proteger a amostra contra oxidação.

O crescimento dos PQW (etapa 5, acima) foi feito com uma estrutura denominada *liga digital*, em contraposição à denominada *liga analógica*. Isso foi feito com a finalidade de se obter amostras com mobilidades melhores, pois amostras de poços quânticos crescidas com liga digital apresentam melhores resultados em medidas ópticas e elétricas [68]. Enquanto o crescimento de uma liga analógica de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ consiste na deposição dos três elementos (Al, Ga, As) simultaneamente nas proporções

estequiométricas desejadas (no caso, $x:(1-x):1$), o equivalente digital consiste de uma camada de AlAs de largura $x \times l$ e uma camada de GaAs de largura $(1-x) \times l$, de modo que ao longo dessa extensão de largura l temos na média a mesma proporção estequiométrica. Portanto, se por um lado o crescimento de um PQW com liga analógica é feito depositando-se simultaneamente os três elementos Al, Ga, As com estequiometria variando gradualmente ao longo da direção de crescimento z (segundo a equação 2, capítulo 1), por outro lado o crescimento do mesmo PQW com liga digital consiste em crescer sucessivas camadas de largura l (até completar a largura desejada do poço), cada uma consistindo de uma camada de AlAs puro de largura $x \times l$ e uma camada de GaAs puro de largura $(1-x) \times l$. O valor $l = 20 \text{ \AA}$ advém de uma otimização baseada na teoria de perturbação de segunda ordem simples de Rayleigh-Schrödinger [69].

Com essa estrutura de crescimento, consegue-se obter amostras de alta qualidade cristalina e conseqüentemente boa mobilidade, fator indispensável para o nosso trabalho. A melhor mobilidade que atingimos à temperatura do He líquido (4,2 K) foi de $590000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, em uma amostra de PQW com $500 \text{ \AA}$ de largura.

POTENCIAIS ANALÓGICOS E DIGITAIS: CÁLCULOS COMPARATIVOS

No capítulo 1, nossos cálculos autoconsistentes se basearam num perfil de potencial de liga analógica. É oportuno tentar um cálculo para uma liga digital. A primeira dificuldade reside no fato de que, ao longo do PQW digital, as sucessivas camadas de AlAs e GaAs têm um número fracionário de monocamadas. Na prática, isso significa que se formam ilhas bidimensionais de uma monocamada, cuja soma das áreas está em proporção com a área superficial da amostra assim como o valor da fração da liga c . Para modelagem computacional, podemos tentar usar o mesmo modelo unidimensional para cálculos autoconsistentes (seção 2 do capítulo 1), criando um potencial com camadas de espessura fracionária (isto é, sem a restrição de números inteiros de monocamadas, convertendo a média estatística das áreas de ilhas ao longo do plano $\{x,y\}$ em uma espessura média, conservando o volume). Outra questão é o número de pontos de integração, o qual está vinculado à malha do potencial digital V_D . Dada a largura de uma camada (l), pode-se procurar o número mínimo de pontos p por camada tais que se possa fazer exatamente a liga com a concentração c desejada fazendo

$V_D(n) = V_D(n+1) = \dots = V_D(n+m) = V_{AlAs}$ e $V_D(n+m+1) = \dots = V_D(n+p) = V_{GaAs}$, onde V_{AlAs} e V_{GaAs} são os *band offsets* do AlAs e do GaAs (n, m, p inteiros). Entretanto, numa primeira instância desconsideramos essa questão, fixando arbitrariamente um número de pontos de integração (o mesmo escolhido para as simulações com potencial analógico), e compensamos esse problema descontando proporcionalmente da altura do potencial das camadas de AlAs. A terceira questão refere-se ao nível da banda de condução do AlAs, cujo mínimo ocorre no ponto X e não pelo ponto Γ , como no caso do GaAs. Por simplicidade, desconsideramos essa questão. Os potenciais de *input* equivalentes (analógico e digital) são exibidos na figura 8.a, e correspondem a um PQW de 500 Å de largura.

Figura 8 – a) Potenciais de *input* analógico (em verde) e digital (em azul) para cálculos autoconsistentes. Na região de barreiras, a liga é analógica em ambos os casos. b) Comparação entre o mesmo potencial analógico (em verde) e o potencial resultante das médias aritméticas do potencial digital digital (em azul) da figura (a), ao longo de cada camada l de 20 Å .

Na figura 9 são apresentados os resultados dos cálculos autoconsistentes para $n_s = 4,7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Em ambos os casos é prevista a ocupação de duas sub-bandas, cujas concentrações eletrônicas são apresentadas na tabela I, e a diferença na concentração da

primeira sub-banda (dominante) é de apenas 6%. A maior discrepância está na forma da função densidade eletrônica, como podemos ver na figura 9: para o potencial digital, é mais confinada na região central. Isso causa, em princípio, uma diferença no cálculo do valor esperado de grandezas, como por exemplo, o fator g médio (o que se fará no capítulo 3), o que, em princípio, aponta vantagem do modelo digital sobre o analógico, pois a largura dessa função é menor.

Figura 9 – Resultados de cálculos autoconsistentes para os potenciais analógico (em verde) e digital (em azul) da figura anterior. São representados os potenciais finais autoconsistentes e as concentrações eletrônicas.

Tabela I – Concentração de elétrons de cada sub-banda, resultante dos cálculos autoconsistentes para $L = 500 \text{ Å}$ e $n_s = 4,7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ com potenciais analógico e digital.

Sub-banda	$n_{s,i} (\times 10^{11} \text{ cm}^{-2})$	
	Digital	Analógico
1	4,168	4,43
2	0,532	0,27

Em linhas gerais, dentro das aproximações consideradas, vemos uma similaridade entre os resultados obtidos para ambos os tipos de potenciais – analógico e

digital –, o que nos basta para adotar o modelo de potencial analógico nos cálculos deste trabalho.

2. Estrutura das amostras

Foi crescida uma série de amostras de PQW variando os parâmetros largura (L) e altura (Δ_1) do poço, altura da barreira (Δ_2), densidade de dopagem delta de Si e *spacer*, seguindo a simbologia apresentada na figura 1 (capítulo 1). Os valores de Δ_1 e Δ_2 foram escolhidos em função da largura do PQW: para $L \leq 1500 \text{ \AA}$, a concentração de Al dentro do PQW varia de zero (no centro) até 20% (nas bordas), de modo que $\Delta_1 = 147,48 \text{ meV}$ e $\Delta_2 = 88,68 \text{ meV}$; para PQW mais largos, com $L > 1500 \text{ \AA}$, a concentração no PQW varia de zero até 27%, e $\Delta_1 = 203,29 \text{ meV}$ e $\Delta_2 = 32,87 \text{ meV}$. Essa escolha também é um fator que garante boa mobilidade. Os parâmetros de todas as amostras estudadas são apresentados na tabela II, em ordem crescente de largura do PQW de cada amostra.

Tabela II - Parâmetros básicos das amostras estudadas. As definições dos parâmetros foram dadas no capítulo 1 (vide figura 1).

Número da amostra	L (Å)	<i>spacer</i> (Å)	δ_{Si} (x10 ¹¹ cm ⁻²)	n ⁺ (x10 ¹⁶ cm ⁻³)	Δ_1 (meV)	Δ_2 (meV)
2537	500	300	5	33,6	147,48	88,68
2536	750	250	5	14,9		
2577	1000	200	50	8,40		
2579		300				
2580		400				
2496	1500	200	5	3,73	203,29	32,87
2535	1700	200	5	4,01		
2534	2200	150	6	2,39		
AG662	4000	100		0,723		

3. Preparo das amostras para a realização de medidas

O preparo das amostras consistiu na litografia de barras Hall, por meio de fotolitografia e corrosão química. A fotolitografia foi feita no Laboratório de Microeletrônica e no Laboratório de Sistemas Integráveis, da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Empregou-se fotorresiste AZ 3312 com pré-*bake* a 110°C por 90 s, rotação de *spinner* 7000 r.p.m.. A exposição foi feita com luz ultravioleta durante 15 s numa fotoalinhadora com lâmpada de 350 W, e a revelação foi feita por 30 s com revelador MIF 300 concentrado. O pós-*bake* foi a 110° C por 1 min. A corrosão foi feita durante 10 min com uma solução de $H_2O : H_2O_2 : H_3PO_4$ na proporção de 50:1:3, cuja taxa de corrosão que medimos à temperatura ambiente é de aproximadamente 1200 Å/min. Após a fotolitografia, a amostra foi cortada em pedaços, cada um deles contendo uma barra Hall. Na figura 10 se apresenta o desenho da barra Hall litografada em nossas amostras, com as dimensões mais relevantes. Nela também se mostra a posição do filme de Au depositado em algumas das amostras, para a produção de portas (*gates*) para a aplicação de campos elétricos.

Figura 10 – Desenho da barra Hall litografada nas amostras, onde se destacam: contatos para injeção de corrente (I_1 , I_2) e para medida de voltagens (V_1 , V_2 , V_3 , V_4). Dimensões na região de interesse, em μm : largura da barra 200 μm , comprimento 500 μm . O círculo amarelo representa o filme de Au depositado em amostras com porta.

Na figura 11.a apresenta-se a fotografia ampliada de uma amostra após o processo de litografia, antes do corte. Após o corte, produziu-se contatos ôhmicos por meio da difusão de In a 400° C por 3 min, em atmosfera de N₂. Na figura 11.b mostra-se a fotografia de uma amostra após esse procedimento e posterior soldagem de terminais elétricos. A seguir, faz-se a soldagem de terminais nos contatos de In, e um teste das qualidades elétricas. A deposição do filme de Au para produção das portas foi feita por *sputtering* com plasma de Ar, durante 3 a 5 min à razão de deposição de ~65Å/min. Previamente à deposição do filme, depositou-se uma camada de fotorresiste, com a finalidade de estabelecer isolamento elétrico (verificou-se que a deposição direta de Au dava margem à passagem de correntes de fuga e difusão desse metal na estrutura, danificando as amostras). Na figura 11.c apresentamos a fotografia de uma amostra já com contatos e terminais, em que se depositou a camada de resiste (nas bordas aparece desuniforme e avermelhado) e o filme de Au (cuja forma é circular, de acordo com o esquema da figura 10). Posteriormente, foi soldado um terminal à superfície do filme de Au, para a aplicação de tensões. O desenho representativo de uma amostra pronta para medidas é representado na figura 11.d.

Figura 11 – a) Uma amostra após a fotolitografia, contendo quatro barras Hall, cada uma vindo a ser uma amostra para medidas de transporte. b) Uma das amostras, contendo uma barra Hall, após o corte, difusão dos contatos ôhmicos de In e soldagem de terminais elétricos. c) Idem, após a soldagem de terminais, deposição da camada isolante de resiste e do filme de Au (reflexo amarelado no centro). d) Desenho de uma amostra pronta para medidas (semelhante à figura c, mas após a soldagem de um terminal no filme de Au), indicando os parâmetros da figura 10 mais o terminal da porta (V_p), e as direções da corrente (verde) e do campo magnético (vermelho) na configuração de campo perpendicular à amostra.

4. Equipamentos para as medidas experimentais

Todas as medidas foram feitas em bobinas supercondutoras, à temperatura do ^4He líquido (4,2 K) superfluido (1,6 K) ou do ^3He (da ordem de dezenas ou centenas de mK). Medidas na faixa de campos magnéticos de até 10 T e às temperaturas do ^4He foram feitas no Laboratório de Novos Materiais Semicondutores do Instituto de Física da Universidade de São Paulo, e medidas a campos de até 13 T bem como as sob refrigeração de ^3He , foram feitas no *Grenoble High Magnetic Field Laboratory* (Grenoble, França). A coleta de dados foi feita usando um amplificador *lock-in* usual acoplado a um microcomputador. A corrente empregada foi de $1\mu\text{A}$. Para medidas com amostra iluminada, utilizou-se um LED vermelho acoplado ao porta amostras, que era ligado e desligado antes das medidas, cujo comprimento de onda é suficientemente alto para excitar elétrons confinados no GaAs (energia de excitação na faixa do infravermelho), os quais são imediatamente capturados pelos PQW. Esse procedimento é normalmente usado para se aumentar a concentração de elétrons nos PQW.

5. Resultados de medidas de Shubnikov-de Haas e Hall

Realizamos uma série de medidas de Hall e Shubnikov de Haas à temperatura de 4,2 K, através das quais se determinou a concentração de elétrons e a mobilidade de transporte para cada uma das amostras relacionadas na tabela II. A tabela III apresenta os principais parâmetros, obtidos experimentalmente.

Tabela III – Concentrações e mobilidades medidas, antes e após a iluminação.

Número da amostra	L (Å)	n_s , escuro ($\times 10^{11} \text{cm}^{-2}$)	μ , escuro ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	n_s , iluminada ($\times 10^{11} \text{cm}^{-2}$)	μ , iluminada ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)
2537	500	4,4	590000	6,4	440000
2536	750	4,4	322000	6,0	302000
2577	1000	4,2	90000	5,9	210000
2579		4,0	131000	6,0	185000
2580		3,4	232000	4,8	342000
2496	1500	3,5	150000	5,5	220000
2535	1700	3,2	220000	5,0	200000
2534	2200	3,1	186000	5,0	180000
AG662	4000	1,5	120000	3,5	240000

A amostra 2537 foi a mais indicada para nossos estudos no capítulo 3, uma vez que apresenta a ocupação de praticamente uma única sub-banda. A vantagem disso reside no fato de que a ocupação de múltiplas sub-bandas resulta invariavelmente no aparecimento de picos sobrepostos na resistividade longitudinal, o que dificulta análise para a determinação experimental do fator g de Landé efetivo através do colapso do *gap* de spin. Além do mais, por ser a amostra de maior mobilidade, tem maiores tempos quântico e de transporte, o que, segundo a equação 26, implica em um parâmetro de alargamento Γ menor, e portanto, picos de oscilação mais definidos – outro fator fundamental para a análise desenvolvida naquele capítulo.

Por outro lado, o conjunto total das amostras formou a base para os estudos do capítulo 4, já que para esses estudos a ampla gama de larguras dos PQW nessas amostras era fundamental. Nesse estudo, a mobilidade não teve importância especial.

Capítulo 3

Investigações sobre a variação
do fator g de Landé em poços
quânticos parabólicos de
 AlGaAs/GaAs

1. O fator g_0 em poços quânticos parabólicos

Tendo em vista a dependência do fator g de bandas (g_0) com respeito ao conteúdo de Al na liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (conforme a equação 32, seção 4, capítulo 1), podemos determinar a forma da variação espacial dessa grandeza ao longo de um PQW. Isso se consegue simplesmente substituindo a equação 2 – que dá a variação de x com a coordenada z – na equação 32. Como exemplo, o resultado para um PQW de 500 Å de largura é apresentado na figura 12, bem como a variação do conteúdo de Al ao longo da direção z .

Figura 12 – Perfil de concentração de Al na liga que constitui uma amostra de PQW de 500 Å de largura (em preto) e perfil da variação do fator g , segundo a equação 32 (em vermelho)

Nessa figura, observamos que o fator g_0 (linha vermelha) assume valores positivos ou negativos: na região central do PQW, aproxima-se de -0,44, valor correspondente ao GaAs puro, ao passo que nas bordas chega a +0,2, e nas barreiras $g = +0,5$. Esse fato é fundamental em nosso trabalho, já que mudanças de sinal no fator g significarão mudanças de sinal na energia de Zeeman. Tal fato pode dar origem a um efeito de “válvula de spin”, e nossas investigações apontam de fato a existência de tal efeito em amostras de PQW de AlGaAs, que pode encontrar aplicação no desenvolvimento de um transistor “válvula de spin”, sem a concorrência de materiais magnéticos.

CÁLCULO DO FATOR g_0 MÉDIO

A variação de g_0 exibida na figura 12 ainda não nos possibilita, de fato, determinar qual a magnitude dos desdobramentos de Zeeman nos níveis de energia. Devemos levar em consideração que o gás de elétrons se estende espacialmente ao longo da direção z de acordo com a densidade auto-consistente $n(z) = \sum_{i=1}^N n_{si} |\psi_i(z)|^2$ (soma em todas as sub-bandas $i=1, \dots, N$), de modo que o valor medido é dado pela média

$$45. \quad \langle g_o \rangle = \frac{\int g_0(z) n(z) dz}{\int n(z) dz} = \frac{\int g_0(z) n(z) dz}{n_s}$$

Em PQW, para baixas densidades de elétrons, as pequenas interações entre elétrons não alteram significativamente o potencial parabólico, cujos auto-estados são os do oscilador harmônico [70]. Nesse caso, para a ocupação de uma sub-banda teremos uma densidade eletrônica na forma de uma gaussiana, concentrada no centro do poço, onde $g_0 = -0,44$. O alargamento da gaussiana contribui para a integral 45 com valores de g_0 menores (em módulo), resultando num valor médio menor do que $|-0,44|$. Para densidades maiores, as interações entre elétrons tendem a alargar a função de distribuição eletrônica, caso em que o valor médio é ainda menor.

Se, em acréscimo, se aplica um campo elétrico estático na direção z , a densidade eletrônica se desloca ao longo dessa direção, e o valor de $\langle g_0 \rangle$ muda gradualmente. Para um determinado valor de campo, $\langle g_0 \rangle$ se anula, e para campos mais elevados, assume valor positivo. Como já dissemos, neste capítulo estudaremos apenas a amostra 2537. Na figura 13 apresentamos os resultados dos cálculos autoconsistentes tomando uma densidade $n_s = 4,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Nessa figura, as curvas de densidade eletrônica tem forma similar à de uma gaussiana. Entretanto, para os casos de campos elétricos a partir de $3 \times 10^4 \text{ V/cm}$, surge um pico adicional de menor intensidade à direita do pico principal, que é o reflexo da população da *segunda sub-banda de energia do PQW*.

Figura 13 – Resultados de cálculos autoconsistentes para um PQW de 500 Å com $n_s = 4,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Linha tracejada: potencial autoconsistente da banda de condução; linha cheia: densidades eletrônicas.

Lembrando entretanto de que, conforme discutido na seção 1 do capítulo 1, a aplicação de um campo elétrico externo na direção z provoca um deslocamento da função de onda ao longo dessa direção de uma quantidade aproximadamente igual a $eE/2a$ (causando pouca alteração nas formas do potencial e da densidade autoconsistentes), podemos esperar que, segundo a equação 45, possamos concentrar o máximo do pico da densidade eletrônica em diferentes posições ao longo da direção z simplesmente mudando a intensidade do campo elétrico. Desse modo, aplicando campos elétricos suficientemente elevados, poderemos ter a densidade eletrônica concentrando-se até próximo às bordas do PQW, onde g_0 é positivo. Nesse caso, eventualmente a média dada pela equação 45 resulte também num valor positivo.

Figura 14 – Gráfico da variação do fator g médio $\langle g \rangle$ em função do campo elétrico E calculada através das equações 1, 24 e 37, para o caso do PQW da figura anterior (o ponto em $5 \times 10^4 \text{ V/cm}$ foge à tendência comum devido ao início da ocupação da segunda sub-banda). A linha pontilhada em azul representa o ajuste de uma reta na faixa de campo de zero até $4 \times 10^4 \text{ V/cm}$.

Na figura 14 apresentamos um gráfico com valores do fator g médio em função do campo elétrico, calculados empregando-se as equações 2, 32 e 45. Observe-se, em particular, a dependência praticamente linear na faixa de campos de zero até aproximadamente $4 \times 10^4 \text{ V/cm}$, para a qual se ajustou a reta

$$46. \quad \langle g_0 \rangle = -0,39 + 0,775.E$$

Para campos elevados ($\sim 5,5 \times 10^4 \text{ V/cm}$), verificamos, de fato, que $\langle g_0 \rangle$ muda de sinal, assumindo valores positivos.

2. Observações sobre a variação do fator g com o campo magnético

Lembremos que, no fim da seção 3 do capítulo 1, mencionamos a dependência da energia de Fermi com respeito ao campo magnético, o que influencia diretamente a condutividade longitudinal – e, portanto, a magnetorresistividade – e a densidade de

estados através das expressões 24 e 25, e certamente modifica a situação apresentada no gráfico da figura 5.A.

Essa dependência provoca, principalmente, deslocamentos nas posições dos picos da magnetorresistividade, fato cujo conhecimento é de crucial importância quando se deseja estudar os desdobramentos de spin em função do campo magnético e, portanto, o fator g . Por esse motivo, dedicaremos nossa atenção agora a uma reelaboração dos ajustes numéricos da magnetorresistividade do final da seção 3 do capítulo 1, agora considerando as variações da energia de Fermi. Para tanto, recorramos à seguinte idéia:

Visto que os elétrons ocupam níveis somente até o nível de Fermi, a integral da densidade de estados por unidade de área até a energia de Fermi deve ser igual à densidade superficial de elétrons n_s [71]:

$$45. \quad n_s = \int_{-\infty}^{E_F(B)} D(E, B) dE,$$

onde se explicitou as dependências funcionais com respeito ao campo magnético B . Explicitamente, considerando a expressão 25,

$$46. \quad n_s = \frac{eB}{h} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\Gamma} \int_{-\infty}^{E_F(B)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-2\left\{\frac{E-E_{n\uparrow}(B)}{\Gamma}\right\}^2} + e^{-2\left\{\frac{E-E_{n\downarrow}(B)}{\Gamma}\right\}^2} \right) dE.$$

Se tratamos de um sistema cuja densidade de elétrons é constante – como ocorre em nossas amostras durante as medidas experimentais –, a expressão 46 constitui uma equação integral cuja solução nos dará a dependência desejada de E_F com respeito ao campo magnético.

Esse problema foi o objeto de outra série de cálculos. O algoritmo iniciou com o cálculo da densidade de estados $D(E, B)$ para um conjunto discreto de valores de campo (conforme desejado, por exemplo, de zero até 10 T) e de energia (limites escolhidos de modo que suas contribuições para a integral em 46 sejam desprezíveis). O índice de soma n na expressão 46 foi tomado variando de zero a 200. A seguir, para cada valor de campo magnético, a densidade de estados foi integrada na variável energia até que a igualdade 46 fosse verificada, de onde se obteve o limite superior de integração que é precisamente a energia de Fermi para o dado valor de campo magnético. Com essa expressão, calculou-se a condutividade longitudinal usando a expressão 29 e, a seguir, a resistividade longitudinal (por inversão do tensor de condutividade, como feito no capítulo 1, figura 5.a).

Tratamos esse problema incluindo a variação do ângulo de inclinação do campo magnético, em virtude desse caso ser o ponto central de nossos estudos e medidas experimentais neste capítulo.

Para o desdobramento de spin, consideramos o gap de spin variando genericamente na forma $\Delta_s \propto B + \text{const.}[B \cos(\theta)]^\lambda$, onde o primeiro termo diz respeito à contribuição de bandas para a energia de Zeeman, que é independente do ângulo e varia linearmente com o campo, e o segundo termo representa o termo de troca, que depende só da componente perpendicular $B_\perp = B \cos \theta$ como já dissemos no final do capítulo 1. Impondo $\langle g_0 \rangle = 0,39$ (valor que calculamos para um PQW de 500 Å para campo elétrico zero), o melhor ajuste dos dados experimentais não deu uma dependência da forma $\sqrt{B}$ e nem mesmo linear para o termo de troca, conforme as previsões teóricas que apresentamos no capítulo 1 seção 5). A dependência foi supralinear, com $\lambda = 1,8$. As curvas ajustadas, bem como os espectros experimentais correspondentes, são apresentadas na figura 15: as medidas foram feitas com a amostra 2537, à temperatura de cerca de 300 mK, tendo uma densidade eletrônica $n_s = 4,4 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ e um tempo quântico $\tau_q = 3,2$ ps. Os valores de ângulos de inclinação também são teóricos, e surgem do ajuste matemático.

Nessa figura, a concordância entre modelo e experimento é verificada para ângulos baixos, enquanto que, para ângulos elevados, o desdobramento de spin calculado tende a ser maior do que o medido. Para conseguir um bom ajuste nessa região, necessitamos aumentar o expoente λ (para $\theta = 79,63^\circ$, $\lambda = 2,0$). Ainda não temos uma explicação exata para esse fato, nem mesmo porque não verificamos dependência linear, e sim supralinear. Eventualmente, pode ser uma simples consequência da limitação da equação 40 (que empregamos em nossos cálculos), já que ela é apenas uma aproximação, conforme discutido no fim da seção 5 do capítulo 1. A propósito, dada a diferença da dependência funcional com respeito ao modelo teórico (o qual prevê variação linear, conforme a equação 35, capítulo 1), não podemos comparar o valor da constante $\alpha = 0,066$ obtida experimentalmente com o valor estimado $\alpha = 0,18$ (página 29).

Figura 15 – Espectros medidos na amostra 2537, à temperatura de 300 mK, com variação do ângulo de inclinação (valores ajustados), em linhas contínuas. Para essa amostra, $n_s = 4,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Em correspondência, espectros ajustados (linhas pontilhadas), com a mesma densidade eletrônica e $\langle g^* \rangle = 0,44 + \gamma [B \cos(\theta)]^\lambda \cos(\theta)$, obtendo-se $\gamma = 2,0$ e $\lambda = 0,8$. Portanto, o *gap* de spin é dado por $\Delta_s = |g_0| \mu_B B + (\alpha \hbar e / m^*) [B \cos \theta]^{1,8}$, e $\alpha = 0,066$.

A dependência funcional supralinear que observamos em nossas medidas é objeto de estudo futuro. Não podemos antecipar nenhuma conclusão desse fato, uma vez que esse assunto ainda depende de uma análise teórica mais detalhada. Entretanto, neste momento, o fato mais importante para nós é o colapso do *gap* de spin, fenômeno já observável na figura 15.

Esse assunto será tratado a seguir.

3. Determinação experimental de $\langle g_0 \rangle$: o colapso do gap de spin

Vimos na seção 5 do capítulo 1 que o gap de spin Δ_s conta com a contribuição do termo intrínseco ao material (que contém g_0) e do termo oriundo da energia de troca E_{tr} , sendo que a primeira contribuição independe da orientação do campo magnético externo, enquanto que o segundo termo depende somente da componente perpendicular à superfície da amostra. Lembremos que os níveis de Landau – independentemente das contribuições de spin – também dependem somente da componente perpendicular do campo magnético. Em face disso, pode-se em princípio buscar a separação dos dois termos de spin realizando medidas de Shubnikov-de Haas com variação do ângulo de inclinação do campo. Essa separação pode ser feita seguindo o procedimento que explicaremos. Além desse procedimento, existem outros, como o *método da coincidência* (*coincidence method*) [72] ou através da medida do gap de spin como energia de ativação para a condutividade em fatores de preenchimento semi-inteiros, $\sigma_{xx} = \sigma_0 \exp(-\Delta_s/2kT)$. [73]

Em primeiro lugar, reescrevemos a expressão 40 trocando a variável B pela variável componente perpendicular do campo, $B_{\perp} = B \cos \theta$:

$$47. E_{n\downarrow,\uparrow}(B_{\perp}) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar e}{m^*} B_{\perp} \pm \frac{1}{2} g_0 \mu_B \frac{B_{\perp}}{\cos \theta} \pm \frac{1}{2} \frac{\alpha \hbar e}{m^*} B_{\perp}.$$

A vantagem dessa dependência funcional está no fato de que, numa série de medidas de Shubnikov-de Haas com variação do ângulo, a posição dos picos das oscilações será invariável, se se desconsidera o desdobramento de spin.

Analisemos agora as alterações induzidas nesse quadro pelo desdobramento de spin. Nessa série de medidas, o primeiro e o terceiro termos se manterão constantes, ao passo que o segundo termo aumentará com o ângulo. Para campos magnéticos baixos, os picos de magnetorresistividade de dois desdobramentos de spin de um mesmo nível de Landau serão quase coincidentes, e se assemelharão a um único pico. Isso ocorre porque o alargamento impede a distinção de ambos. Entretanto, para campos mais elevados, as contribuições de spin se fazem perceber e nota-se uma separação gradual dos picos de desdobramento. Para um dado valor fixo de $B_{\perp}$, essa separação será comandada justamente pelo termo de Zeeman associado a g_0 , o qual agora varia com o ângulo segundo $\cos \theta^{-1} = \sec \theta$.

Figura 16 (página anterior) – a) Medidas de Shubnikov-de Haas da amostra 2537 com variação do ângulo de inclinação entre zero (curva inferior) até $85,5^\circ$ (curva superior) (temperaturas na faixa de 120 – 250 mK). Os retângulos tracejados representam pares de picos de desdobramento de spin associados a um mesmo nível de Landau (explicação no texto). Os círculos marcam o momento em que uma série de picos (na vertical) sofre colapso, o que ocorre num ângulo específico. b) A mesma série de medidas, representadas num mapa de cores para melhor visualização do colapso do gap de spin. Nessa figura, destaca-se o colapso do gap de spin de um par de picos localizado em aproximadamente $B \cos(\theta) = 1,4$ T.

Esse comportamento foi, de fato, observado por nós em medidas de Shubnikov-de Haas com variação do ângulo de inclinação, particularmente no caso da amostra 2537 (PQW de 500 Å de largura) a temperaturas extremamente baixas (na faixa de 120 a 250 mK), que mostramos nas figuras 16-a e 16-b. Como já dissemos, a temperatura baixa garante uma boa resolução dos picos de desdobramento de spin, enquanto que a amostra 2537 foi a que apresentou menor ocupação de sub-bandas.

Na figura 16, pares de picos correspondentes a um mesmo nível de Landau aparecem contornados por retângulos tracejados. Quando em azul, trata-se de pares de picos claramente distinguíveis, e quando em laranja, pares que, a ângulos elevados aparecem separados, mas em ângulos baixos aparecem colapsados em um único pico. O momento em que ocorre o colapso é assinalado por círculos vermelhos. Esse colapso progressivo também pode ser observado nas sucessões de espectros calculados da figura 15 (evidentemente também nos espectros experimentais apresentados na figura 15, já que são da mesma amostra que corresponde à figura 16). Durante a passagem de $\theta = 0^\circ$ até $85,5^\circ$, em algum momento ocorre o colapso do gap de spin, traduzido pela mescla do par de picos. Esse é justamente o momento em que é válida a equação 38, motivo pelo qual a repetiremos aqui (após uma simples manipulação algébrica considerando que $\omega_c = eB \cos \theta / m^*$):

$$48. \frac{\Delta_s}{\hbar \omega_c} \frac{m_0}{m^*} = \frac{|g_0|}{2} \cos \theta^{-1} + \frac{m_0}{m^*} \alpha .$$

Acompanhando um dado par de picos (por exemplo, o rotulado com numero 4 na figura 16), desde a medida com $\theta = 85,5^\circ$, em que aparecem completamente separados, até as de ângulos inferiores, escolhemos o ângulo de medida em que melhor parece que ocorre

o colapso (que corresponde ao assinalado pelo círculo vermelho). Tomando o cosseno desse ângulo, o valor do campo B do pico colapsado e tempo quântico extraído através da interpolação da fórmula de Lifshitz-Kosevich (equação 19), traçamos dois eixos cartesianos nas variáveis $\cos \theta^{-1}$ (abscissas) e $(\Delta_s / \hbar \omega_c) \cdot (m_0 / m^*)$ (ordenadas) e nele colocamos um ponto correspondendo aos valores dessas variáveis que foram obtidos (lembrando que $\Delta_s = \hbar / \tau_q$, $\omega_c = eB \cos \theta / m^*$). Repetimos o procedimento, para um segundo par de picos (por exemplo, o par 5), e assim sucessivamente, com quantos pares de picos em quantos se consiga distinguir colapso, no conjunto de medidas experimentais disponível. Ao fim, espera-se que o conjunto de pontos forme uma reta cujo coeficiente angular seja $|g_0|/2$, e cujo coeficiente linear seja $(m_0 / m^*)\alpha$. Do coeficiente angular extrai-se diretamente o valor de $|g_0|$. O valor do tempo quântico obtido pelo ajuste da fórmula de Lifshitz-Kosevich foi $\tau_q = 1,5 ps$ (a metade do empregado no ajuste das curvas da figura 15, entretanto, esse ajuste é menos confiável na determinação dessa grandeza).

O resultado desse procedimento é apresentado na figura 17. Podemos constatar uma obediência ao comportamento linear, com exceção de um ponto, cuja razão é o fato de corresponder a um ângulo de inclinação relativamente elevado, $\theta = 75^\circ$, região em que $\cos \theta^{-1}$ varia rápido com θ aumentando a propagação de erro (surpreendentemente, para o ponto se situar na reta, θ deveria ser $76,35^\circ$, o que representa uma diferença de apenas $1,35^\circ$). O coeficiente angular da reta interpolada nos dá $|g_0| = 0,38$. Notemos a boa concordância com o valor calculado $|g_0| = 0,39$ (seção 1 deste capítulo, ou ainda a equação empírica 46 com $E = 0$), com menos de 3% de discrepância.

Figura 17 –Gráfico da variável $(\Delta_s/\hbar\omega_c) \cdot (m_0/m^*)$ em função de $\cos\theta^{-1}$. Observa-se que os pontos seguem a tendência linear esperada (equação 36). O módulo do fator g_0 extraído é $|g_0| = 0,38$.

Esse procedimento foi repetido com medidas realizadas com a aplicação de tensões de porta $V_g = -2,0$ e $-4,0$ V. Na figura 18 apresentamos um gráfico semelhante ao da figura anterior, com os pontos experimentais e as retas interpoladas, incluindo os casos com diferentes tensões de porta.

Figura 18 – Idem à figura 17, agora com a aplicação de tensões de porta $V_g = -2,0$ e $-4,0\text{V}$.

O potencial negativo (repulsivo) aplicado na porta afasta a densidade eletrônica do centro do PQW, implicando na modificação do valor do fator g_0 médio, o que de fato é denunciado pelos valores ajustados pelas inclinações das retas (explicação no texto).

Neste momento devemos interpretar os diferentes valores obtidos para o fator g_0 (em módulo) para as diferentes tensões de porta. Vimos na seção 1 do capítulo 1 que a aplicação de um campo elétrico na direção z provoca um deslocamento da densidade eletrônica, o que invariavelmente afeta o valor de $\langle g_0 \rangle$, conforme mostra genericamente a expressão 45. Traçamos então na figura 19 o gráfico dos valores de g_0 em função da tensão de porta (em violeta), e verificamos que a tendência é praticamente linear. Por outro lado, é justamente esse comportamento o previsto pela expressão 39 (válida em princípio para a faixa de valores de campo elétrico que estudamos), que também apresentamos no mesmo gráfico (em azul). Na escala de correspondência tentativa $E = 9,09 \times 10^3 V_g$, há quase superposição dos pontos experimentais e calculados. O fator de escala depende da distância d entre o PQW e a porta, já que trata-se de um capacitor em que $d = V_g / E = 1,10 \times 10^{-4} \text{ cm} = 1,10 \text{ } \mu\text{m}$. Visto que a camada superficial de AlGaAs/GaAs tem aproximadamente $1000 \text{ } \text{\AA}$ e que a camada isolante de fotorresiste tem uma espessura da ordem de $1 \text{ } \mu\text{m}$, vemos uma boa concordância entre resultados (notemos que essas

considerações independem da constante dielétrica da estrutura – tanto da amostra como da camada isolante de fotorresiste).

Figura 19 – Comparação entre os valores de g_0 obtidos experimentalmente em função da tensão de porta (em púrpura) apresentados na figura 18 e calculados pela fórmula $\langle g_0 \rangle = -0,39 + 0,775.E$ (equação 39) (em azul). Para a conversão empregou-se a fórmula $E = 9,09 \times 10^3.V_g$.

Uma pequena ressalva poderia ser feita. Sabemos que o efeito mais conhecido da aplicação de potenciais em portas é a depleção, isto é, a diminuição da densidade de portadores, devido à repulsão eletrostática (quando o sinal da carga dos portadores e do potencial aplicado é o mesmo, como em nosso caso). Desse modo, os cálculos autoconsistentes cujos resultados apresentamos na figura 13 não deveriam ser feitos com densidade fixa de $n_s = 4,7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, e sim com densidades gradualmente decrescentes em função da tensão aplicada. Entretanto, para a faixa de tensões aplicada de 0 a -4 V, verificamos uma depleção mínima (medidas de Hall revelam uma depleção da ordem de 3%). Desse modo, o efeito é desprezível.

Concluimos, portanto, que medidas de Shubnikov-de Haas com variação do ângulo de inclinação a temperaturas da ordem de milikelvin são hábeis em nos proporcionar condições de determinar com segurança o valor do fator g_0 médio em PQW, o que, obviamente, deve ser válido para outras heteroestruturas. A condição para isso é a

de que a mobilidade e a concentração sejam suficientemente altas para que o espectro de Shubnikov-de Haas apresente várias oscilações e picos estreitos, o que permita distinguir o colapso do gap de spin.

Conclusões do capítulo 3

Neste capítulo, mostramos o resultado de cálculos autoconsistentes da densidade eletrônica em um PQW de 500 Å de largura, com a aplicação de um campo elétrico externo. A partir desses cálculos, determinamos o fator g_0 médio. Em paralelo, apresentamos medidas do colapso do *gap* de spin numa amostra também de PQW de 500 Å de largura através de uma série de medidas de Shubnikov-de Haas com variação do ângulo de inclinação do campo magnético em relação à amostra. Essas medidas do colapso do *gap* de spin nos possibilitaram medir experimentalmente o fator g_0 médio. Verificamos uma boa concordância entre os valores obtidos por cálculos autoconsistentes e os medidos experimentalmente.

Verificamos, também, através dos cálculos autoconsistentes, que o fator g_0 médio muda de sinal, quando o campo elétrico externo é suficientemente elevado.

Medidas do colapso do *gap* de spin nos habilitaram a determinar o valor da constante α associada à contribuição de troca do *gap* de spin (E_{tr}). O valor obtido foi muito próximo da previsão teórica para a liga AlGaAs.

Por outro lado, fizemos um ajuste de uma série de medidas de Shubnikov-de Haas com variação do ângulo de inclinação para a mesma amostra de PQW de 500 Å de largura empregando-se a fórmula de Kubo para a condutividade. O melhor ajuste matemático nos levou a uma dependência supra-linear de E_{tr} com o campo magnético, ao invés da esperada dependência linear. Esse fato eventualmente pode ser uma consequência do fato de termos empregado, por aproximação, a equação 40, entretanto, requer estudos futuros.

Capítulo 4

O efeito válvula de spin em
poços quânticos parabólicos
de AlGaAs/GaAs

1. O efeito válvula de spin – teste com medidas de transporte

Tendo em vista as considerações do capítulo anterior, é oportuno tentar averiguar a possível existência de um efeito válvula de spin em nossas estruturas. Não consta, até o momento, que se tenha feito o uso de medidas de transporte com essa finalidade.

As medidas foram realizadas com as amostras de PQW relacionadas no capítulo 2, a temperaturas variando entre 1,5 K e 50 K, com variação do ângulo de inclinação.

Inicialmente realizamos medidas de Hall com ângulo de inclinação $89,9^\circ$ (campo quase paralelo à amostra) a diferentes temperaturas na amostra AG662 (com PQW de 4000 Å), as quais são apresentadas na figura 20, em conjunto com medidas da resistividade longitudinal.

A medida de resistividade longitudinal a 1,5 K mostra uma série de oscilações na região de campo baixo ($|B| < 2,5T$), denominadas oscilações diamagnéticas de Shubnikov-de Haas, as quais resultam da ação combinada de campos elétricos e magnéticos. Em poços com várias sub-bandas ocupadas, a variação do campo magnético provoca a depopulação gradual de cada sub-banda, provocando o aparecimento de uma oscilação [74]. Na figura 20 podemos distinguir cinco oscilações, o que nos revela que cinco sub-bandas são ocupadas nesse poço. Com o aumento da temperatura, as oscilações se fundem, e resta apenas uma estrutura com um único mínimo que corresponde à depopulação do último nível de Landau.

Com respeito à resistividade Hall, ela é visivelmente linear com o campo magnético aplicado na mesma faixa de campo. A campos mais elevados e baixa temperatura, desvia-se desse comportamento, mas a linearidade é gradualmente recuperada com o aumento da temperatura (30- 50 K). Essa dependência nos suscita a idéia de que haja uma energia de ativação governando o fenômeno.

Figura 20 - Resistências diagonal (R_{xx}) e de Hall (R_{xy}) da amostra com PQW de 4000 Å em função do campo magnético com ângulo de inclinação de $\approx 89,1^\circ$ a diferentes temperaturas. As curvas de resistência Hall acima de $|B| \cong 4T$ e temperaturas baixas sofrem um desvio da linearidade, que desaparece a temperaturas elevadas. Conforme mostra o desenho no canto inferior direito, o campo magnético se orientou ao longo do plano perpendicular a amostra que contém a corrente.

As medidas foram repetidas para a amostra 2496 (com PQW de 1500 Å), a duas temperaturas diferentes (1,5 K e 30 K) e duas orientações diferentes de campo magnético e corrente, conforme mostra a figura 21. As oscilações diamagnéticas da magnetorresistência revelam a ocupação de quatro sub-bandas. Em concordância com o esperado [75], a amplitude dessas oscilações é maior quando o campo magnético se orienta num plano perpendicular à corrente (figura 21, em azul), em comparação ao caso oposto (figura 21, em vermelho), isto é, é co-planar com a corrente. Em acréscimo, podemos perceber que, para campos maiores que $|B| \cong 4T$, o comportamento da resistência de Hall desvia-se da linearidade também em dependência da temperatura, como ocorreu com a amostra de 4000 Å. Um fato que se pode cogitar é a possibilidade desse efeito estar ligado à orientação preferencial do campo magnético, ou mesmo à corrente. Entretanto, experimentalmente não se constatou nenhuma variação da resistência de Hall mediante uma mudança do sinal da corrente ou da orientação do campo magnético, para ambas as amostras (note-se, em

particular, que o domínio de valores do campo magnético nas medidas abrange valores positivos e negativos).

Figura 21 – Resistências longitudinal (R_{xx}) e Hall (R_{xy}) da amostra de 1500 Å para campo magnético quase paralelo à amostra ($\approx 89,6^\circ$) em geometrias e temperaturas diferentes. Em azul, medidas de R_{xx} com campo perpendicular à corrente, e em vermelho, com uma componente paralela à corrente (campo magnético co-planar com a corrente). Curvas contínuas denotam medidas a 1,5 K, e pontilhadas a 30 K. Verde: resistência Hall. Amarelo: reta para comparação.

Na figura 22-a, as medidas de Hall são repetidas a 1,5 e 50 K da figura 20 (PQW de 4000 Å). Enquanto o comportamento a campo baixo é tipicamente o efeito Hall clássico, descrito pela equação 9 (seção 3, capítulo 1), verifica-se que para campos acima de 4,2 T é bem descrito pela equação

$$38. \frac{R_{xy}}{\cos \theta} = - \frac{\alpha (B - B_0)}{en_s}$$

onde $B_0 = 2$ T e α é um coeficiente. A figura 22-b mostra evolução com a temperatura da resistência Hall a campo alto, através da razão entre as inclinações das curvas:

$$\frac{\frac{\Delta R_{xy}^{alto}}{\Delta B}}{\frac{\Delta R_{xy}^{baixo}}{\Delta B}} = \frac{\Delta R_{xy}^{alto}}{\Delta R_{xy}^{baixo}}. \text{ Essa figura revela que a inclinação aumenta com a diminuição}$$

da temperatura. Em termos desse parâmetro, aparentemente, o efeito do desvio da linearidade na resistividade Hall parece muito mais acentuado na amostra com $L = 1500$ Å do que na amostra com $L = 4000$ Å. O fato significativo é o de que a inclinação do efeito Hall, para ambas as larguras, é aproximadamente duas vezes maior a campo alto do que a campo baixo.

Figura 22 – a) As medidas de Hall para a amostra com $L = 4000$ Å, a temperaturas de 1,5 e 50 K (extraídas da figura 20). A curva tracejada obedece a equação $R_{xy} / \cos \theta = -\alpha(B - B_0) / en_s$, e extrapola a zero o comportamento a campo alto para 1,5 K. b) Razão entre as inclinações da resistência Hall a campo alto e baixo, em função da temperatura, para as amostras com $L = 4000$ Å e $L = 1500$ Å.

É oportuno, agora, investigar a variação do desvio da linearidade em função da largura do PQW. Na figura 23, são apresentadas as curvas de resistência Hall e longitudinal em função do campo magnético à temperatura de 1,6 K, para uma série de amostras com $L = 500, 750, 1000$ e 2200 Å.

Figura 23 – Resistências longitudinal (R_{xx} , em preto) e Hall (R_{xy} , em vermelho) com campo quase paralelo, à temperatura de 1,6 K, para amostras de $L =$ a) 500 Å ($\approx 89,7^\circ$); b) 1000 Å ($\approx 89^\circ$); c) 1700 Å ($\approx 89,4^\circ$); d) 2200 Å ($\approx 88,6^\circ$). As linhas tracejadas em vermelho seguem o comportamento linear a campo baixo (equação que governa o efeito Hall ordinário $R_{xy} / \cos \theta = -B / en_s$). Verificamos que para os poços de maior largura (c e d) ocorre o maior desvio do comportamento linear de R_{xy} a campo alto (marcadores em azul, à direita, em (c) e (d)).

Na figura 23, observamos que o número de oscilações da magnetorresistencia cresce com o aumento da largura do PQW, revelando que o número de sub-bandas ocupadas cresce com a largura. Quanto à resistência Hall, verifica-se claramente que o desvio da linearidade a campo alto de fato só ocorre nas amostras de PQW com maior largura. Isso nos leva a acreditar que o fenômeno é associado à largura do poço e/ou ao número de sub-bandas ocupadas. Na realidade, mostraremos que o critério determinante é o percentual de preenchimento do poço (conforme definido na página 9 do capítulo 1),

caracterizado pela razão entre largura média da densidade eletrônica e a largura do poço, razão essa que depende da largura do poço e da concentração n_s . Quanto ao número de sub-bandas, ele influencia diretamente a resistência Hall clássica (isto é, a resistência Hall associada ao efeito Hall convencional, sem considerar as manifestações do efeito Hall quântico), mas não se relaciona com o efeito observado, conforme mostraremos.

EFEITOS DE OCUPAÇÃO DE MÚLTIPLAS SUB-BANDAS

Vamos considerar agora quais os efeitos da ocupação de múltiplas sub-bandas na resistência Hall. Cada sub-banda ocupada representa um canal de condução independente para o fluxo de elétrons, e sua contribuição é tanto maior quanto maiores forem a sua mobilidade e a sua densidade superficial de elétrons. No conjunto, definimos uma corrente total como a soma das correntes que fluem por cada sub-banda, a partir da qual determinamos a resistência resultante da amostra – não só a resistência longitudinal R_{xx} , mas também a resistência Hall R_{xy} .

No caso de ocupação de uma única sub-banda, a resistência de Hall é linear com o campo e dada pela equação 9 (capítulo 1, seção 3):

$$39. \quad R_{xy} = -\frac{B}{en_s}$$

e assim, não sofre os desvios de linearidade e nem depende da temperatura, observados experimentalmente em nossas amostras. Por outro lado, numa estrutura com ocupação de duas sub-bandas [76],

$$40. \quad R_{xy} = \frac{\langle \mu^2 \rangle + (r\mu_1\mu_2 B)^2}{\langle \mu \rangle^2 + (r\mu_1\mu_2 B)^2} \frac{B}{en_s}$$

onde μ_i são as mobilidades de cada uma das duas sub-bandas, e r é um coeficiente de espalhamento inter sub-bandas. No limite de campo alto, essa expressão se reduz à equação 39, como se pode facilmente verificar. Em contrapartida, para campo baixo (nesta seção desconsideraremos os sinais de B e de R_{xy} , tomando somente os valores absolutos por simplicidade),

$$41. \quad R_{xy} \approx \frac{\langle \mu^2 \rangle}{\langle \mu \rangle^2} \frac{B}{en_s} > \frac{B}{en_s}$$

pois $\langle \mu^2 \rangle > \langle \mu \rangle^2$, e assim a inclinação a campo baixo é maior do que a campo alto. Em contrapartida, o desvio da linearidade que observamos nas medidas de Hall em (algumas

de) nossas amostras apresenta comportamento inverso, isto é, a campo alto a inclinação é maior do que a campo baixo. Em prosseguimento, vale a pena procurarmos estender o caso para, por exemplo, três sub-bandas, o que ainda não foi estudado por outros autores. Nossos cálculos para o caso ideal de ausência de espalhamento inter sub-bandas, levaram à expressão

$$42. \quad R_{xy} = \frac{c_1 + c_2 B^2 + c_3 B^4}{c_4 + c_5 B^2 + c_6 B^4} \frac{B}{en_s}$$

onde os coeficientes c_n ($n = 1, \dots, 6$) são formas multilineares das mobilidades μ_i , concentrações $n_{s,i}$ e coeficientes de espalhamento r_i de cada uma das três sub-bandas ($i = 1, 2, 3$). Sem a necessidade de explicitar cada um desses coeficientes, apenas nos restringimos a estudar novamente os casos-limite: a campo alto, temos novamente o efeito Hall ordinário:

$$43. \quad R_{xy} \approx \frac{c_3}{c_6} \frac{B}{en_s} \equiv \frac{B}{en_s},$$

e a campo baixo, a resistência Hall se reduz a uma expressão um tanto mais complexa, mas que exhibe uma inclinação maior do que B/en_s :

$$44. \quad R_{xy} = \frac{c_1}{c_4} \frac{B}{en_s} = \left(\frac{\sum_i \mu_i}{\langle \mu \rangle} - \frac{1}{2} \frac{\sum_{i,j,k} n_{s,i} \mu_j \mu_k}{n_s \langle \mu \rangle^2} \right) \frac{1}{en_s} B > \frac{1}{en_s} B,$$

conforme verificamos (vide nota final deste capítulo). Novamente, esse comportamento é oposto ao que observamos experimentalmente.

Para o caso de ocupação de quatro ou mais sub-bandas, a expressão para a resistência Hall em função do campo magnético se torna progressivamente mais complexa e de difícil análise. Sem procurar desenvolvê-la explicitamente para tais casos, poderíamos acreditar, por extensão, que $R_{xy,B \rightarrow 0}$ seja maior do que $R_{xy,B \rightarrow \infty}$ para qualquer números de sub-bandas ocupadas – o que vimos ser realidade para a ocupação de duas e três sub-bandas. Entretanto, isso não é a realidade. No caso de três sub-bandas, a inequação 44 é válida quase que casualmente, pois se verifica somente para valores de $n_{s,i}$ ($i = 1, 2, 3$) que por coincidência são fisicamente possíveis (vide nota final). É plausível acreditar que, aumentando o número de sub-bandas, essa condição possa eventualmente se enfraquecer ainda mais e tenhamos um subdomínio $\{n_{s,1}, n_{s,2}, n_{s,3}\}$ em que R_{xy} não satisfaça a inequação 44. De fato, sob outro ponto de vista, o aumento do número de sub-bandas ocupadas leva a inequação 44 a se tornar em igualdade: isso ocorre porque, no limite de um número

elevado de sub-bandas, o gás bidimensional se converte em gás tridimensional, caso em que o efeito Hall passa a ser caracterizado pela equação ordinária $R_{xy} = B / en_s$ com dependência linear com respeito ao campo magnético. Ainda assim, mostraremos que o desvio da linearidade observado nas medidas de Hall a campo (quase) paralelo não tem relação com efeitos de sub-bandas.

Figura 24 – Resistência Hall para a amostra de PQW de 2200 Å de largura, com campo quase paralelo (à esquerda, $\approx 89,4^\circ$) e perpendicular (à direita), à temperatura de 4,2 K. Curvas em vermelho correspondem a medidas no escuro, enquanto que, em azul, após iluminação da amostra. As linhas verticais e as setas (em laranja) indicam o valor aproximado de campo em que o desvio da linearidade se inicia, nas medidas após iluminação. Note-se que o desvio da linearidade nas duas configurações de orientação de campo são opostas (a campo quase paralelo, $R_{xy,B \rightarrow 0} < R_{xy,B \rightarrow \infty}$, e a campo perpendicular, $R_{xy,B \rightarrow 0} > R_{xy,B \rightarrow \infty}$).

Na figura 24, são apresentados os gráficos de medidas de Hall para a amostra de PQW de 2200 Å de largura, em quatro situações diferentes: com campo quase paralelo e perpendicular, amostra no escuro e após iluminação. Podemos perceber que, no escuro, ambas as curvas têm comportamento linear. Entretanto, após iluminação, os comportamentos são totalmente diversos: a campo quase paralelo, $R_{xy,B \rightarrow 0} < R_{xy,B \rightarrow \infty}$, enquanto que a campo perpendicular, $R_{xy,B \rightarrow 0} > R_{xy,B \rightarrow \infty}$. Esse comportamento a campo perpendicular mostra, portanto, o efeito da ocupação de múltiplas sub-bandas, perceptível e

bem acentuado após iluminação (em que a densidade eletrônica é elevada e há ocupação de muitas sub-bandas), mas não no escuro (apesar de nessa condição haver mais de uma sub-banda ocupada). Note-se que, em particular, seja a campo quase paralelo ou perpendicular, R_{xy} para campo baixo após a iluminação é menor do que no escuro – o que é evidente, uma vez que em linhas gerais a inclinação é inversamente proporcional à concentração n_s (equação 9).

Um outro fato significativo diz respeito à depopulação das sub-bandas, em campo quase paralelo (fenômeno que já citamos no início deste capítulo). Na figura 23-d, observamos que as oscilações da magnetorresistencia só ocorrem abaixo de um campo limite, de valor aproximado de 2,5 T, acima do qual espera-se a depopulação da última sub-banda. Em vista disso, esperar-se-ia que na região de campo alto a resistência Hall obedecesse a equação 39, correspondendo ao caso de uma única sub-banda ocupada, cujo valor da resistência Hall coincide com o comportamento a campo baixo. Entretanto, isso está em desacordo com o desvio da linearidade observado, que ocorre a cerca de 3–4 T.

Para corroborar o fato de que os comportamentos anômalos da resistência Hall a campo perpendicular e quase paralelo (após iluminação da amostra) não têm a mesma origem, façamos ainda outra relação: na medida a campo quase paralelo, o desvio da linearidade ocorre aproximadamente em $|B| = 2T$. Considerando o ângulo de inclinação $\theta \approx 89,4^\circ$, a componente perpendicular desse valor de campo é $B_\perp \approx 2 \cos(89,4^\circ) = 0,021 T$. Se houvesse uma correlação, esperaríamos que o desvio da linearidade na medida a campo perpendicular ocorresse nesse campo, entretanto, como vemos na figura, ocorre em um campo dez vezes maior ($B_\perp \approx 0,2 T$).

A figura 25 se assemelha às anteriores, mas agora referida à amostra AG662 (4000 Å). Notemos que agora a resistividade medida com campo perpendicular não apresenta nenhum efeito de desvio de linearidade, mesmo após a iluminação. De fato, no escuro ela apresenta 4 sub-bandas ocupadas, e após a iluminação, 6 sub-bandas. Nessas condições já se aproxima o limite de tridimensionalidade, e o efeito Hall é o ordinário. Em contrapartida, a medida a campo quase paralelo apresenta – assim como no caso da amostra 2534 (2200 Å) – a mesma característica de $R_{xy,B \rightarrow 0}^\parallel < R_{xy,B \rightarrow \infty}^\parallel$, sendo que novamente $R_{xy,B \rightarrow 0}^\parallel = R_{xy,B \rightarrow 0}^\perp = 1 / en_s$.

Figura 25 - Resistência Hall para a amostra de PQW de 4000 Å de largura, com campo quase paralelo (à esquerda, $\approx 89,4^\circ$) e perpendicular (à direita), à temperatura de 4,2 K. Curvas em preto correspondem a medidas no escuro, enquanto que em vermelho, após a iluminação da amostra.

Em face dessas considerações, descartamos, portanto, a hipótese de que os desvios da linearidade observados estejam ligados a efeitos de ocupação de múltiplas sub-bandas, ou à sua depopulação.

POSSIBILIDADE DE EFEITO HALL ANÔMALO

Outra possibilidade que se pode considerar é a da ocorrência de efeito Hall anômalo, entretanto, essa também não é uma causa do desvio da linearidade observado.

O efeito Hall anômalo (também denominado extraordinário) ocorre como consequência do espalhamento assimétrico dos elétrons de condução por átomos [77], e em materiais ferromagnéticos amorfos é extremamente pronunciado. Nesses casos, empiricamente, a resistência Hall é dada por

$$45. \quad R_{xy} = R_0 B + R_S M$$

onde R_0 é o coeficiente de Hall ordinário, R_S o coeficiente de Hall anômalo, e M é a magnetização da amostra. No limite de campos elevados, o material atinge a magnetização de saturação e o termo $R_S M$ torna-se constante, enquanto $R_0 B$ continua crescendo

linearmente com B e R_{xy} torna-se portanto independente da temperatura, diferentemente do que observamos em nossas amostras de PQW. Nessa situação, $R_0 B \gg R_S M$, logo, em aproximação, $R_{xy, B \rightarrow \infty} \approx R_0 B = (1/en_s)B$ (que coincide com o comportamento ordinário) e $R_{xy, B \rightarrow \infty}/B < R_{xy, B \rightarrow 0}/B$, enquanto que em nossas amostras $R_{xy, B \rightarrow \infty} > (1/en_s)B$, e portanto temos justamente o oposto: $R_{xy, B \rightarrow \infty}/B > R_{xy, B \rightarrow 0}/B$ (novamente desconsideramos os sinais de B e de R_{xy}).

Apenas para um maior esclarecimento sobre a natureza do efeito Hall anômalo e sua manifestação em materiais em geral (incluindo semicondutores não magnéticos, como AlGaAs), faremos algumas explanações. Existem basicamente dois modelos para esse espalhamento: *skew scattering* [77] e *side jump* [78], ambos dependentes do spin do elétron. No primeiro caso, uma interação spin-órbita entre o elétron e o centro espalhador provoca um desvio na trajetória do elétron, caracterizado por um ângulo de espalhamento (da ordem de 10^{-2} rad). No segundo caso, o elétron salta para uma trajetória paralela à anterior ao espalhamento, distante de cerca de 10^{-13} cm. Para ambos os modelos, um dos entes envolvidos no processo – portador ou espalhador – é magnético. Não obstante a pequena deflexão, a grande quantidade de centros espalhadores existentes nos ferromagnetos amorfos (onde praticamente todos os átomos são centros espalhadores) leva a um desvio global extremamente pronunciado, de modo que R_S chega a superar o coeficiente Hall ordinário em duas ou três ordens de grandeza.

Em semicondutores não magnéticos, a contribuição anômala do efeito Hall é extremamente pequena [79], podendo ser muito menor do que a contribuição ordinária. Em InSb, por exemplo, o ângulo de espalhamento anômalo é quatro ordens de magnitude menor do que o ângulo de deflexão ordinário. Por outro lado, o desvio da linearidade da resistência de Hall das amostras de PQW de GaAs/AlGaAs (a campo elevado) chega a ser da mesma ordem de magnitude que a parte intrínseca ao efeito Hall (ordinário).

Essas considerações nos habilitam a afirmar que o fenômeno que observamos em nossas amostras não é de modo algum a manifestação do efeito Hall anômalo.

EFEITO DA VARIAÇÃO DO FATOR g DE LANDÉ

Na tentativa de explicar o desvio da linearidade em R_{xy} , sugerimos um outro mecanismo. Conforme explanado nos capítulos 1 e 3, existe uma variação do fator g de Landé ao longo da direção do crescimento (z) nas amostras de PQW. No limite de campos

magnéticos elevados, na aproximação semi-clássica, os elétrons descrevem órbitas ciclotrônicas cujo raio varia com $\sqrt{B}$, caracterizadas portanto por um comprimento magnético $l_B = \sqrt{\hbar / m\omega_c}$. Para o caso em que o campo magnético é paralelo ao gás de elétrons (perpendicular à direção z), a partir de um certo limite de campo l_B se aproxima do valor da largura do PQW, e o caráter ciclotrônico sobressai em relação ao confinamento imposto pelo potencial parabólico. Desse modo, o elétron fica confinado em órbitas circulares, localizado em regiões restritas do PQW ao longo da direção z . De acordo com a localização na direção z , teremos um valor específico para o fator g médio $\langle g_0 \rangle$. Esse fenômeno é exemplificado na figura 26.

O deslocamento do elétron ao longo da direção z faz com que ele mude sua orientação de spin. Quando se localiza perto do centro do PQW, $\langle g_0 \rangle$ é negativo, e então o elétron assume spin “*up*” para minimizar a energia. Ao se deslocar para as regiões das bordas do PQW, onde $\langle g_0 \rangle$ é positivo, deverá ter seu spin mudado para “*down*”. A essa mudança de estado de spin associamos um processo de espalhamento, o qual é caracterizado por um tempo de espalhamento τ_s . Esse espalhamento deve interferir nas propriedades de transporte da amostra, reduzindo sua mobilidade μ e sua condutividade σ . Evidentemente essa influência do espalhamento deve se refletir também nas componentes do tensor resistividade, tensor esse que é obtido pela inversão do tensor de condutividade. Acreditamos que as alterações da inclinação da resistência Hall que observamos em nossas amostras sejam originadas pelo mecanismo de espalhamento citado.

Figura 26 – Representação de algumas órbitas ciclotrônicas (círculos) e perfis de variação do fator g para nossas amostras de PQW de $L \leq 1500 \text{ \AA}$ (em preto) e de $L > 1500 \text{ \AA}$ (em cinza), o qual assume valores positivos e negativos. As órbitas representadas têm raios $r = L, \frac{1}{2}L, \frac{1}{4}L$ (laranja, verde, azul, respectivamente), correspondendo a valores crescentes de campo $B = \hbar/eL^2, 2\hbar/eL^2, 4\hbar/eL^2$. No cálculo de $\langle g_0 \rangle$ para cada caso, é óbvio que essa grandeza assume valores muito maiores no caso do máximo confinamento magnético, já que contribuições de sinais opostos na integral de $\langle g \rangle$ (equação 45, capítulo 3) se cancelam, dando menor resultado.

No próximo capítulo, quando apresentarmos a idealização de um transistor válvula de spin, mostraremos de que modo se forma a barreira de energia de Zeeman associada à mudança do sinal de $\langle g_0 \rangle$.

CONTRIBUIÇÃO DE TROCA PARA O FATOR g

Ressalteamos, a propósito, que para campos magnéticos com ângulo de inclinação elevado – como no caso de nossas medidas a campo quase paralelo – o valor da contribuição de troca para g (equações 28 e 31, capítulo 1) é

$2\alpha m_0/m^* \cos \theta = 5,5 \cos \theta \approx 0,01 - 0,02$, valor da ordem de dez vezes menor do que g_0 , e por isso desprezível. Em virtude disso, a contribuição de troca praticamente não participa do efeito do desvio da linearidade que observamos nas medidas de Hall em nossas amostras.

ACÇÃO DO CAMPO MAGNÉTICO NA FUNÇÃO DE ONDA

Uma questão que pode surgir é a de qual a influência do campo magnético sobre a densidade eletrônica. Essa questão é importante, uma vez que não sabemos se a densidade eletrônica conserva a sua forma – o que poderia invalidar nossas conclusões baseadas no movimento eletrônico ao longo da direção z .

Para resolver essa questão, inicialmente escrevemos o campo magnético genericamente como $\vec{B} = (B_x, 0, B_z)$, representando um campo inclinado de um ângulo $\theta = \arctan(B_x / B_z)$ em relação à normal à superfície da amostra. Podemos escolher o potencial vetor no calibre $\vec{A} = (zB_x, 0, xB_z)$. O potencial de confinamento, dado por $V(z) = az^2$ (capítulo 1), pode ser escrito sugestivamente em termos da frequência característica Ω de um oscilador harmônico, $V(z) = \frac{1}{2}m^*\Omega^2 z^2$, de modo que $\Omega = 2/L\sqrt{2\Delta_1/m^*}$. O hamiltoniano total será [80] (desconsiderando as interações entre elétrons, as quais podem, em aproximação, ser em muitos casos incluídas no potencial $V(z)$, com a escolha apropriada do parâmetro Ω):

$$46. \quad \hat{H} = \frac{(\vec{p} - \vec{A})^2}{2m^*} + V(z) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + \frac{1}{2m^*} (\hat{p}_y - eB_z x + eB_x z)^2 + \frac{m^*\Omega^2 z^2}{2}$$

Para diagonalizar $\hat{H}$, fazemos uma rotação no sistema de coordenadas em torno do eixo y , de um ângulo α , passando do sistema (x, y, z) para um sistema (X, y, Z) , onde

$$47. \quad \begin{pmatrix} X \\ y \\ Z \end{pmatrix} = \tilde{R}(\alpha) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & \sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

Escolhendo o ângulo de rotação tal que $\tan(2\alpha) = \sin 2\theta / (\cos 2\theta - (\Omega/\omega_c)^2)$, conseguimos eliminar termos cruzados nas variáveis coordenadas. Uma vez eliminados os termos cruzados, eliminamos termos lineares em x, z perfazendo binômios quadrados. O hamiltoniano resultante é idêntico ao de um oscilador harmônico em duas dimensões,

$$48. \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m^*} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega_1^2(X - X_0)^2 + \frac{1}{2}m^*\omega_2^2(Z + Z_0)^2$$

cujos autovalores são (onde n_1, n_2 são inteiros):

$$49. \quad E_{i,j} = \hbar\omega_1(n_i + 1/2) + \hbar\omega_2(n_j + 1/2)$$

onde se introduziu as frequências ω_1, ω_2 , dadas por

$$50. \quad \begin{cases} \omega_1 = \sqrt{\Omega_Z^2 + \Omega^2 \sin^2 \alpha} \\ \omega_2 = \sqrt{\Omega_X^2 + \Omega^2 \cos^2 \alpha} \end{cases}; \begin{cases} \Omega_X = \omega_c \sin(\theta - \alpha) \\ \Omega_Z = \omega_c \cos(\theta - \alpha) \end{cases}$$

e X_0, Z_0 são centros de coordenada, dados por $X_0 = \hbar k_y \Omega_Z / (m^* \omega_1^2)$ e $Z_0 = \hbar k_y \Omega_X / (m^* \omega_2^2)$. Como consequência, a única alteração introduzida pelo campo magnético na forma da função de onda com respeito à variável z é o seu deslocamento de uma quantidade z_0 . Na figura 27 se apresenta o gráfico de $z_0 = -X_0 \sin \alpha + Z_0 \cos \alpha$ em função de B para nossas amostras (obs.: nos cálculos, empregamos $\theta = 89^\circ$, e Δ_1 variando conforme a amostra, vide tabela II do capítulo 2), com $|k_y| = k_F = \sqrt{2m^* E_F} / \hbar$ (valor máximo de k_y). O valor máximo de cada pico não ultrapassa 11-13% da largura do PQW correspondente, o que é um valor relativamente pequeno. Para ângulos de inclinação mais elevados, essa percentagem em nossas amostras aumenta até o limite de 30%. Observando a figura 27, notamos que os picos ocorrem em valores de campo menores para PQW mais largos, e, além do mais, a campos elevados $Z_0 \ll L$ para poços largos. Em outras palavras: por exemplo, para $B = 10T$ e $\theta = 90^\circ$, $Z_0(L = 500, \theta = 90^\circ) \approx 125 \text{ \AA} = 1/4 L$ (valor próximo a L), enquanto que $Z_0(L = 4000, \theta = 90^\circ) \approx 160 \text{ \AA} = 0,04 L \ll L$. O efeito é portanto menor em poços mais largos.

Figura 27 – Centro de coordenada $z_0 = -X_0 \sin \alpha + Z_0 \cos \alpha$ para as amostras estudadas, em função do campo magnético. Considerou-se em comum o valor médio $\theta = 89^\circ$.

Desta maneira, as alterações na densidade eletrônica devido à ação do campo magnético não alteram nossas conclusões, o que prevalece mesmo quando se inclui no hamiltoniano (equação 48) os termos referentes às interações entre elétrons (interação coulombiana e de troca-correlação), conforme já mostrado por outros autores [81].

A validade da inequação 44 significa que o funcional abaixo é sempre maior que um:

$$(i) \quad \Lambda(\mu_{i=1,2,3}; n_{s,i=1,2,3}) = \frac{\sum_i \mu_i}{\langle \mu \rangle} - \frac{1}{2} \frac{\sum_{i,j,k} n_{s,i} \mu_j \mu_k}{n_s \langle \mu \rangle^2} > 1.$$

A busca do mínimo desse funcional leva a um sistema complexo de equações quadráticas com termos mistos nas variáveis de mobilidade e concentração, que dificulta a análise. Optamos por um estudo gráfico. Para isso, por simplicidade aproveitamos o fato de que Λ é invariável com as transformações $n_{s,i} \rightarrow \alpha n_{s,i}$ e $\mu_i \rightarrow \beta \mu_i$ (α, β reais, $i = 1, 2, 3$), de modo que podemos por exemplo fixar a mobilidade da primeira sub-banda como $\mu_1 = 1$, e transformar o vínculo $n_{s,1} + n_{s,2} + n_{s,3} = n_s$ em

$$a + b + c = 1 \quad (n_{s,1} \rightarrow a n_s; n_{s,2} \rightarrow b n_s; n_{s,3} \rightarrow c n_s).$$

Assim, o problema se restringe a estudar o conjunto de funções $V_{(a;b)}(\mu_2, \mu_3)$

$$(ii) \quad V_{(a;b)}(\mu_2, \mu_3) = \Lambda(\mu_1, \mu_2, \mu_3, n_{s,1}, n_{s,2}, n_{s,3} = n_s - n_{s,1} - n_{s,2}) \Big|_{\mu_1=1; n_{s,1}=a n_s; n_{s,2}=b n_s}$$

para vários conjuntos de valores dos parâmetros a, b . Na realidade, a inequação (i) não é sempre válida, mas os casos em exceção não correspondem a situações físicas reais. Essas situações reais são caracterizadas pela hierarquia de valores de concentrações das sub-bandas

$$(iii) \quad n_{s,1} > n_{s,2} > n_{s,3}$$

oriunda do fato de que são proporcionas às energias de Fermi correspondentes, que também seguem hierarquia similar devido à hierarquia dos autovalores de energia sucessivos das sub-bandas. Considerando somente os casos físicos reais, a análise gráfica revela que de fato $\Lambda > 1$, sendo que $\Lambda \rightarrow 1$ para o caso extremo $a \rightarrow 1$ ($n_{s,1} \rightarrow n_s, n_{s,2}, n_{s,3} \rightarrow 0$) e $\Lambda \rightarrow 2$ para o outro caso extremo $a \rightarrow 0,5$ ($n_{s,1} \rightarrow 1/2 n_s$).

Conclusões do capítulo 4

Verificamos um comportamento peculiar na resistência Hall de algumas amostras de PQW caracterizado por um desvio da linearidade, mas com comportamento assintótico linear cuja inclinação é maior do que a esperada. Por outro lado, a inclinação a campo baixo é característica do efeito Hall ordinário.

Esse fato foi observado apenas para amostras de PQW de maior largura e com alta densidade de elétrons, a temperaturas baixas (até algumas dezenas de graus kelvin), e com o aumento da temperatura o comportamento linear usual é recuperado.

Essa anomalia não pode ser explicada como consequência da ocupação de múltiplas sub-bandas de energia, e nem como uma manifestação do conhecido efeito Hall anômalo, típico de materiais ferromagnéticos.

Acreditamos que a causa do fenômeno seja a manifestação de um efeito “válvula de spin”, em que a supressão do movimento eletrônico ao longo da direção z altera as componentes do tensor condutividade, e assim também a resistência Hall. Essa supressão é causada pela variação do fator g de Landé ao longo desse eixo, o que subentende a existência de uma barreira de energia de Zeeman.

Capítulo 5

Perspectiva: o transistor
válvula de spin de
 AlGaAs/GaAs

1. O transistor válvula de spin

No capítulo 3, nos ocupamos de medidas do fator g efetivo ($\langle g_0 \rangle$) em PQW de AlGaAs/GaAs através do efeito Shubnikov-de Haas, auferindo boa concordância com o modelo teórico. Vimos que o fator g efetivo pôde ser variado, e, não obstante os valores experimentais tenham se restringido a positivos, o modelo teórico previu a possibilidade de se mudar o sinal dessa grandeza através da aplicação de potenciais externos.

Já no capítulo 4, medidas de efeito Hall revelaram um comportamento não usual, que atribuímos a um efeito válvula de spin em PQW largos de AlGaAs/GaAs, intimamente associado à variação do fator g ao longo dessa estrutura.

Neste momento, apresentaremos a idealização de um dispositivo que surge como consequência natural desses estudos: o transistor válvula de spin de AlGaAs/GaAs, que designaremos simplesmente como transistor de spin de AlGaAs.

Se as interações energéticas entre o spin de correntes eletrônicas e a magnetização permanente de materiais nos ofereceram dispositivos eficazes baseados na magnetorresistência gigante (GMR, *Giant MagnetoResistance*), os quais atualmente ocupam posição de destaque no mercado, podemos ter a esperança de obter êxito com dispositivos de operação similar, construídos com estruturas de AlGaAs/GaAs (ou mesmo outros materiais convenientes), e cujo princípio de funcionamento prescindia de materiais magnéticos – conquanto dependa de interações energéticas envolvendo spins –, só dependendo de variações do fator g .

Na figura 28 apresentamos um primeiro esboço de nossa proposta para a realização de um transistor de spin de AlGaAs, com uma estrutura de poço parabólico, e o princípio de seu funcionamento. Ele, como os atuais dispositivos de GMR, é apenas um dispositivo que opera em função de propriedades do spin, mas não chega a ser um autêntico dispositivo spintrônico ideal, que aceita como sinal de entrada uma corrente de spin, a manipula e a devolve para processamento por outros dispositivos externos – isto é: vale-se do spin como ferramenta, mas não o emprega como finalidade em si, manipulando-o, gerando correntes de spin, transportando informação através de correntes de spin, etc., integrado a uma rede de dispositivos.

Figura 28 - Um transistor de spin de PQW de AlGaAs. a) Perfil da banda de condução, em meV; b) perfil de concentração de Al na liga; c) variação do fator g ao longo da estrutura. d) O dispositivo: uma corrente I (com sentido apontado pela seta cinza), produzida por um fluxo de elétrons (esferas azuis), atravessa um PQW, submetido a um campo magnético B paralelo à superfície da amostra. De acordo com a localização da densidade eletrônica (representada pelas curvas em verde), $\langle g_0 \rangle$ será positivo ou negativo, de modo que os elétrons adquiram spin “up” (setas verdes) ou “down” (setas vermelhas), para que a energia de Zeeman $sg\mu_B B$ ($s = \pm 1/2$) seja a mínima. A localização eletrônica é manipulada por uma porta (em cinza), à qual é aplicado um potencial (V_p).

Na figuras 28.a, b, c, apresentamos figuras semelhantes às figuras 3 (em preto) do capítulo 1 e figura 12 (preto e vermelho) do capítulo 3: são apresentados o perfil da banda de condução, a variação do conteúdo de Al (eixo horizontal) e a variação do fator g , ao longo da direção de crescimento (eixo vertical), para um PQW de 500 Å de largura. Na coordenada $z = 0$, temos $c = 0$, o que corresponde a GaAs puro, e assim $g(0) = -0,44$. No intervalo de $z = -z_1$ até $z = +z_1$, temos uma variação gradual de c (figura 28.b) que gera um potencial parabólico (figura 28.a), e nesse intervalo g assume valores positivos e negativos (figura 28.c), variando de $g(-z_1) = 0,25$ até $g(0) = -0,44$ e novamente voltando ao valor positivo, $g(+z_1) = 0,25$. Nas regiões de barreira, $g = 0,5$.

Na figura 28.d se apresenta uma vista lateral da estrutura do dispositivo, que é submetido à ação de um campo magnético B . Através da região central flui uma corrente I , que, longe da porta, está associada a uma densidade eletrônica cujo centro coincide com o centro do PQW, e $\langle g_1 \rangle = -0,39$. Quando o fluxo de elétrons atinge a região abaixo da porta, a ação do potencial V_p é intensa e a função de onda é deslocada ao longo da vertical. Nessas condições, o valor de $\langle g_2 \rangle$ muda, e para potenciais de porta suficientemente elevados torna-se positivo. Essa mudança representa uma variação da energia de Zeeman $\Delta = \langle g_1 \rangle \mu_B B - \langle g_2 \rangle \mu_B B$ que, a temperaturas extremamente baixas, é maior do que kT e representa portanto uma barreira de energia. Desse modo, espera-se que haja uma redução da corrente I . *O dispositivo nos habilita, portanto, o controle da corrente através da aplicação de um potencial na porta, através de um mecanismo associado ao spin.*

APLICAÇÕES DO TRANSISTOR VÁLVULA DE SPIN

A operação do transistor válvula de spin, conforme o que verificamos até agora, leva-nos à conclusão de que ele em nada supera um transistor comum: em ambos controla-se uma corrente através da aplicação de um potencial modulador, sendo que a diferença básica reside no fato de que num transistor comum esse controle baseia-se na depleção de cargas, enquanto que no transistor válvula de spin o que governa o mecanismo é a barreira de energia de Zeeman resultante da variação espacial do fator g de Landé. O transistor válvula de spin requer, em acréscimo, a ação de um campo magnético externo.

Visto como um dispositivo individual, o transistor válvula de spin pode parecer no mínimo prescindível à tecnologia; ou no máximo, um simples equivalente de transistores comuns. Entretanto, no âmbito da spintrônica, um transistor comum pode não

satisfazer os requisitos necessários. De fato, foge ao propósito central da spintrônica, que é justamente o de manipular o spin eletrônico. Em contrapartida, o transistor válvula de spin já é mais afeito a esse propósito, pois lida com o spin. Ele não controla verdadeiramente o spin de um fluxo de corrente de elétrons como desejaria a spintrônica, no sentido de que uma corrente de elétrons polarizada (ou não) que entra no transistor válvula de spin não sai dele polarizada; ele apenas *se vale* das propriedades do spin eletrônico para alterar a corrente. Entretanto, ele se iguala em importância e em princípio de operação, pelo menos, aos conhecidos dispositivos que operam à base da magnetorresistência gigante, largamente aplicados comercialmente, sem entretanto, necessitar do concurso de materiais ferromagnéticos em sua constituição para, baseando-se assim unicamente na tecnologia de semicondutores. Iguala-se também, ao conhecido transistor de Datta-Das, proposto em 1990 [82] – cujo funcionamento, entretanto, ainda não foi provado.

CONTRIBUIÇÃO DE TROCA E ÂNGULO DE INCLINAÇÃO DO CAMPO

O controle da corrente por meio da tensão de porta é, em última análise, uma consequência da variação espacial do fator g de bandas. Entretanto, uma vez que existe também a contribuição de troca, a qual é uma propriedade do gás bidimensional de elétrons para a qual não está prevista a variação espacial, ela pode mascarar o efeito. Nesse caso, é necessário suprimir o seu efeito, o que se pode fazer com a inclinação do campo magnético. Para um ângulo de inclinação pequeno (isto é, campo quase perpendicular à amostra), $2\alpha m_0/m^* \cos \theta \approx 2\alpha m_0/m^* = 5,5$, que é muito maior do que $\langle g_0 \rangle$ em qualquer condição. Desse modo, o auto-estado de spin do gás de elétrons é determinado por efeito de muitos corpos – o qual depende unicamente da densidade superficial de elétrons n_s , através do parâmetro α (conforme expressão 28, seção 5, capítulo 1) – e não da variação de g ao longo do PQW. A condição para que o efeito válvula de spin realmente ocorra é, portanto, a de que *o dispositivo opere na configuração de campo quase paralelo*, quando $\cos \theta$ é pequeno e $2\alpha m_0/m^* \cos \theta$. Tomando $\langle g_1 \rangle \approx -0,4$, $\langle g_2 \rangle \approx +0,2$, isso significa que $\theta \geq 84^\circ$ (aproximadamente).

TRANSISTOR DE SPIN DE POÇO TRAPEZOIDAL

Nosso trabalho se concentrou unicamente no estudo de amostras de poços parabólicos, heteroestrutura que tem sido bastante estudada em nosso grupo de pesquisa

especialmente por suas boas propriedades de transporte. Outra propriedade singular é a preservação da forma parabólica independentemente do campo elétrico aplicado na direção perpendicular, conforme vimos no capítulo 1. Entretanto, a condição essencial para o funcionamento do transistor de spin é a variação do fator g com a composição da liga AlGaAs, sem, em princípio, impor nenhuma restrição adicional, de modo que podemos pensar em outras formas de potencial.

Uma estrutura simples é a de um poço de forma trapezoidal. Na figura 29-a apresentamos o perfil da banda de condução (linha contínua, em vermelho) de um poço trapezoidal de 500 Å de largura com liga de AlGaAs de 31% nas barreiras, e variação linear no interior do poço. Escolhemos uma variação de zero (GaAs puro) a 20% dentro do poço. Correspondentemente, $g(z)$ varia dentro do poço de $g(-500\text{Å}) = -0,44$ a $g(+500\text{Å}) = +0,254$ (conforme equação 32, capítulo 1). A variação do fator g ao longo da estrutura é apresentada também na figura 29-a (linha pontilhada, em verde). Na figura 29-b, apresenta-se o resultado de cálculos autoconsistentes para uma densidade eletrônica $n_s = 4,4 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, igual à empregada nos cálculos para o PQW de mesma largura (500 Å) efetuados no capítulo 3 (figuras 13 e 14). Na figura 29-b, as curvas em preto correspondem ao caso de campo elétrico externo nulo, enquanto que em vermelho, com um campo igual a $-5 \times 10^4 \text{V/cm}$. O valor médio de g varia de $\langle g_0 \rangle = -0,31$ (campo nulo) a $\langle g_0 \rangle = +0,21$ (com campo elétrico), de modo que a diferença entre esses valores é 0,52. Em contrapartida, para o PQW com a mesma largura verificamos, no capítulo 3 que a variação se estende de $\langle g_0 \rangle = -0,39$ a $\langle g_0 \rangle = 0,20$, o que representa uma diferença de 0,6. Podemos considerar que ambos os casos são equivalentes, a grosso modo, pois poderíamos em princípio, aumentar o valor do campo elétrico e obter valores maiores de $\langle g_0 \rangle$. Em todo caso, a eletrostática impõe um limite, uma vez que, a partir de um certo campo a função de onda escapa do confinamento. Ressaltemos em particular que, reduzindo a densidade para $1,5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, não há mudança significativa nos resultados. Com respeito à largura do poço, para poços mais largos o campo elétrico necessário para se obter resultados equivalentes aos de um poço mais estreito é menor, mas obtemos resultados próximos.

Figura 29 - a) Perfil da banda de condução de um poço trapezoidal com variação do conteúdo de Al de 0 a 20% dentro do poço (linha vermelha), que correspondente a uma variação do fator g (linha pontilhada verde) de -0,44 a +0,254. b) Resultados de cálculos autoconsistentes para uma densidade eletrônica fixa $n_s = 4,4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, na ausência de campo elétrico externo (linhas pretas) e sob a ação de um campo elétrico igual a $-5 \times 10^4 \text{ V/cm}$ (linhas contínuas: perfis dos potenciais autoconsistentes; linhas pontilhadas: densidades eletrônicas).

O EFEITO VÁLVULA DE SPIN NO TRANSISTOR DE SPIN

Neste momento, faremos um estudo mais detalhado do efeito válvula de spin no transistor de spin que estudamos. Para tanto, vamos estudar o efeito da barreira de energia de Zeeman $\Delta = \langle g_1 \rangle \mu_B B - \langle g_2 \rangle \mu_B B$ na propagação de uma onda plana e^{ikx} que representa um fluxo de corrente de elétrons na direção de x positivo, tomando por simplicidade apenas o caso de um dispositivo com PQW em sua estrutura.

A equação de Schrödinger para o caso tridimensional, incluindo o potencial de confinamento $V(z) = \frac{1}{2} m^* \Omega^2 z^2$ e o termo de Zeeman com o fator g dependente da coordenada z é:

$$51. \quad \left(\frac{1}{2m^*} [\vec{p} - e\vec{A}]^2 + V(z) + \hat{\sigma}g(z)\mu_B B \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

onde $\hat{\sigma}$ é o operador de spin (matriz de Pauli correspondente à projeção na direção z).

Para o caso particular de campo magnético ao longo da direção y $\vec{B} = B\hat{j}$, perpendicular ao fluxo de corrente I que escolhemos na direção x , podemos empregar o calibre $\vec{A} = (zB, 0, 0)$. Nessa configuração, reescrevemos a equação 51 como:

$$52. \quad \left(\frac{1}{2m^*} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + [\hat{p}_z - ezB]^2) + V(z) + \hat{\sigma}g(z)\mu_B B \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Se $V_p = 0$ (sem aplicação de potencial na porta), a solução dessa equação dá um conjunto de ondas planas nas direções x e y , enquanto que na direção z há confinamento. Podemos resolver a equação 52 somente nas variáveis y e z , obtendo uma equação unidimensional do tipo

$$53. \quad \frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} \chi(x) = \varepsilon(k_y, B) \chi(x),$$

onde χ é a função de onda na direção x . A função $\varepsilon(k_y, B)$ depende do campo magnético B e do número de onda k_y , bem como dos autovalores quantizados associados à variável z – dependência essa que está implícita e não nos interessa salientar. Na equação 53, o grau de liberdade na variável x determina também um espectro de valores de energia em função de um número de onda k_x associado a essa variável x . Desse modo, reescreveremos os autovalores da equação 53 de maneira mais geral, na forma $\varepsilon(k_x, k_y, B)$. Os valores de k_x e k_y são determinados pela energia de Fermi através de $\sqrt{k_x^2 + k_y^2} \leq 2m^* E_F / \hbar$. Quanto ao confinamento espacial na direção z , ele já foi estudado no capítulo 4 (equações 46 a 50 com $\theta = \pi/2$). Ele é, para a condição de campo paralelo, regido unicamente pela frequência $\omega_2 = \sqrt{\omega_c^2 + \Omega^2}$, enquanto que o centro da função de onda se desloca na direção z no máximo para Z_0 (devido à ação do campo magnético), que é pequeno para campos magnéticos elevados e PQW largos. Nesse caso, a distribuição eletrônica se assemelha à do caso $B = 0$, para a qual, segundo nossos cálculos autoconsistentes, ela se distribui por uma larga extensão espacial do PQW. Em qualquer caso, podemos determinar $\langle g_0 \rangle$, que assume um valor específico para cada caso (em função da largura, do campo magnético, e da densidade eletrônica), que designaremos por g_I e suporemos negativo.

Sejam $x = a$ e $x = b$ ($a < b$) as coordenadas da porta na direção x , e consideremos agora que $V_p \neq 0$. Longe dessa região, a influência do potencial de porta é

desprezível e valem todas as considerações do parágrafo anterior. Entretanto, na região $a \leq x \leq b$ o potencial da porta é intenso, e a densidade eletrônica é deslocada de sua posição. Em virtude disso, o valor de $\langle g_0 \rangle$ mudará para, digamos, $\langle g_0 \rangle = g_2$. Levando em consideração as equações 32 e 45, esperamos que para um valor suficientemente grande de V_p , tenhamos $g_2 > 0$. Isso significa que $\langle g_0 \rangle$ não é constante ao longo de toda a extensão da coordenada x . Podemos distinguir, então, três regiões distintas no domínio de x : região I, para $x \leq a$; região II, para $a \leq x \leq b$ e região III para $b \leq x$, e definir uma função

$$54. \quad g(x) = \begin{cases} g_1, & x < a; x > b \\ g_2, & a \leq x \leq b \end{cases}$$

e generalizar (em aproximação) a equação 53 para todo o domínio de x , na forma:

$$55. \quad \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} + \hat{g}(x)_B B \right) \chi(x) = \varepsilon(k_x, k_y, B) \chi(x)$$

Nesse caso, escrevemos genericamente a solução como um espinor:

$$56. \quad \chi(x) = \begin{pmatrix} \phi^\uparrow(x) \\ \phi^\downarrow(x) \end{pmatrix}$$

onde $\phi^\uparrow(x)$, $\phi^\downarrow(x)$ são autoestados de spin *up* e *down* (autovalores da matriz de Pauli $\hat{\sigma}_3 = \hat{\sigma}$), isto é,

$$57. \quad \begin{aligned} \hat{\sigma} \phi^\uparrow(x) &= +1/2 \phi^\uparrow(x) \\ \hat{\sigma} \phi^\downarrow(x) &= -1/2 \phi^\downarrow(x) \end{aligned}$$

Com as expressões 55, 56 e 57 chegamos ao sistema de equações:

$$58. \quad \begin{aligned} \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} + 1/2 g(x) \mu_B B \right) \phi^\uparrow(x) &= \varepsilon(k_x, k_y, B) \phi^\uparrow(x) \\ \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m^*} - 1/2 g(x) \mu_B B \right) \phi^\downarrow(x) &= \varepsilon(k_x, k_y, B) \phi^\downarrow(x) \end{aligned}$$

Na resolução do sistema de equações 58, lembremos que, para $x \ll a$ ou $x \gg b$, temos ondas planas. Entretanto, na região da porta temos uma barreira de energia de Zeeman $\Delta g \mu_B B = (g_2 - g_1) \mu_B B$ e, dependendo de k_x e k_y , podemos ter $\varepsilon(k_y, B)$ maior ou menor do que a altura da barreira. Isso distingue dois comportamentos possíveis: onda plana ou exponencial real. Em outras palavras:

$$\text{Caso A:} \quad \varepsilon(k_y, B) > \Delta g \mu_B B: \phi(x) \sim e^{\pm i k x} \text{ (ondas planas);}$$

Caso B: $\varepsilon(k_y, B) < \Delta g \mu_B B$: $\phi(x) \sim e^{\pm kx}$ (exponencial real).

Essas considerações definem a variação espacial de $\chi(x)$, restando agora analisar a parte dependente do spin. Dentre as soluções possíveis, devemos escolher sempre a de menor energia. Na região distante da porta, o termo de Zeeman tem seu menor valor para spin *down*, já que g_2 é positivo. Por outro lado, na região da porta, o termo de Zeeman troca de sinal, e assim o spin muda para *up*.

Esses dois casos são ilustrados na figura 30, e serão estudados separadamente.

Figura 30 – Propagação de uma onda provinda de $x = -\infty$ que marcha no sentido de x positivo e sua passagem através da barreira de energia de Zeeman. Em azul, as ondas que caminham no sentido de x positivo, e em vermelho as ondas refletidas na direção oposta. Na região II, no caso de $\varepsilon(k_y, B) > \Delta g \mu_B B$, temos ondas planas (a). Em oposição, para $\varepsilon(k_y, B) < \Delta g \mu_B B$, temos soluções exponenciais reais (b).

Caso A ($\varepsilon(k_y, B) > \Delta g \mu_B B$) – Podemos escrever a solução geral nas três regiões I, II e III como:

$$\begin{aligned}
 \chi_I(x) &= \exp(ik_{\uparrow}x) + R_I \exp(-ik_{\uparrow}x) \\
 59. \quad \chi_{II}(x) &= S_{II} \exp(ik_{\downarrow}x) + R_{II} \exp(-ik_{\downarrow}x) \\
 \chi_{III}(x) &= S_{III} \exp(ik_{\uparrow}x)
 \end{aligned}$$

Nessas expressões, definimos

$$60. \quad \begin{aligned} k_{\uparrow} &= \sqrt{2m^* (\varepsilon - \frac{1}{2} |g_1| \mu_B B)} / \hbar \\ k_{\downarrow} &= \sqrt{2m^* (\varepsilon + \frac{1}{2} |g_2| \mu_B B)} / \hbar \end{aligned}$$

que designam os números de onda na coordenada x , que correspondem à menor energia de desdobramento Zeeman. R_I e R_{II} designam as amplitudes das ondas refletidas nas regiões I e II, enquanto S_I , S_{II} e S_{III} , são as amplitudes das ondas propagadas na direção da corrente I (sentido de $-x$ para $+x$). Para determinar esses coeficientes podemos tentar aplicar as condições usuais de continuidade da função de onda e de sua derivada nos pontos a e b , apesar de, nas vizinhanças desses pontos, não termos a solução real (já que em torno desses pontos a variação de $g(x)$ é suave, e não abrupta como neste modelo matemático). Façamos, então:

$$61. \quad \begin{cases} \chi_I(a) = \chi_{II}(a); & \chi_I'(a) = \chi_{II}'(a) \\ \chi_{II}(b) = \chi_{III}(b); & \chi_{II}'(b) = \chi_{III}'(b) \end{cases}$$

A partir disso, segue que a densidade de probabilidade da onda emergente $\Pi_{III} = |S_3|^2$ na região III é dada por:

$$62. \quad \Pi_{III}^{\varepsilon > \Delta g \mu_B B} = \frac{1}{\cos^2(k_{\downarrow}[a-b]) \left(\frac{k_{\downarrow}^2 - k_{\uparrow}^2}{2k_{\downarrow}k_{\uparrow}} \right) + 1}.$$

Caso B ($\varepsilon(k_y, B) < \Delta g \mu_B B$) – Procedemos de maneira semelhante, fazendo agora

$$63. \quad \begin{aligned} \chi_I(x) &= \exp(ik_{\uparrow}x) + R_I \exp(-ik_{\uparrow}x) \\ \chi_{II}(x) &= S_{II} \exp(-k_{\downarrow}x) + R_{II} \exp(k_{\downarrow}x) \\ \chi_{III}(x) &= S_{III} \exp(ik_{\uparrow}x) \end{aligned}$$

Após manipulação algébrica similar, encontramos a densidade de probabilidade na região III para este caso:

$$64. \quad \Pi_{III}^{\varepsilon < \Delta g \mu_B B} = \frac{1}{\sinh^2(k_{\downarrow}[a-b]) \left(\frac{k_{\downarrow}^2 - k_{\uparrow}^2}{2k_{\downarrow}k_{\uparrow}} \right) + \cosh^2(k_{\downarrow}[a-b])}$$

Essa expressão traduz a fração da onda incidente e^{ikx} que atravessou a barreira por tunelamento.

Tanto no caso I quanto no caso II, a fração de onda transmitida é sempre menor do que a incidente, já que as expressões 62 e 64 são sempre menores do que um – exceto na situação (trivial) em que $g_1 = g_2 = 0$. Isso significa que a variação do sinal do fator g

ao longo da estrutura representa uma barreira de energia que se opõe à passagem de corrente, o que é a manifestação de um efeito válvula de spin.

Tomando valores típicos da variação do fator g em nossas estruturas, verificamos que o desdobramento Zeeman é da ordem de $10^{-1} meV$. Evidentemente, a temperaturas elevadas essa barreira de energia se constitui num obstáculo menor à passagem de corrente, e essas temperaturas são caracterizadas basicamente por $T > 10^{-1} meV$, isto é, $T > 1,2K$. Uma vez que essa temperatura é muito inferior à temperatura ambiente, surge imediatamente a questão de que esse dispositivo não tem possibilidade de aplicação prática. Em resposta a isso, nosso primeiro propósito é o do estudo do fenômeno em si, sem ainda, neste estágio, nos preocuparmos com as conveniências na aplicação comercial. Em acréscimo, na prática pode-se optar por outras ligas para a produção do transistor de spin, ao invés de AlGaAs: sabe-se que em alguns materiais o fator g de Landé pode assumir valores extremamente elevados, como no GaSb, em que chega $g_0 = -7,8$ [83]; no InAs, onde $g_0 = -14,6$ [83,84]; ou no InSb, com $g_0 = -50,6$ [84]. Nesse caso particular do InSb, g_0 é duas ordens de grandeza superior ao do GaAs por exemplo, em que $g_0 = -0,44$. Com respeito à liga AlGaAs, a equação 30 (que dá uma previsão teórica da variação do fator g de Landé em AlGaAs), nos mostra que nessa liga g_0 assume o valor máximo (em módulo) de 1,386 (AlAs puro) – neste caso também muito inferior ao correspondente em InSb. Em contrapartida, o valor da barreira de energia de Zeeman também aumenta proporcionalmente segundo o mesmo fator de escala, o que implica num aumento na temperatura de operação do dispositivo também em até duas ordens de grandeza. A escolha do material mais adequado deve incluir as conveniências tecnológicas.

Conclusões do capítulo 5

Neste capítulo, propusemos o modelo de um transistor válvula de spin construído apenas com a liga AlGaAs, e sem, portanto, o concurso de materiais magnéticos.

A idealização desse dispositivo foi possível graças ao fato de que nessa liga o fator g de Landé varia em função do conteúdo de Al. Com a aplicação de potenciais elétricos de porta numa amostra de, por exemplo, PQW, desloca-se a densidade eletrônica para regiões em que o fator g médio tem valor diferente daquele sem a aplicação de potenciais. A essa mudança está associada uma barreira de energia de Zeeman, o que causa portanto um efeito válvula de spin. A operação do dispositivo deve ocorrer sob a ação de um campo magnético externo. Para suprimir a contribuição de troca, é necessário que o campo se oriente paralelamente ao plano do PQW.

Nossas previsões mostram que o mesmo fenômeno também pode ocorrer em um poço trapezoidal, o que nos leva a concluir que outras formas de potencial podem ser empregadas na construção do transistor válvula de spin.

A restrição à operação desse dispositivo é a temperatura: para nossas estruturas, deve ser em torno de 1,2 K, que é extremamente baixa. Para contornar esse problema, propomos o emprego de outros materiais semicondutores, em que o fator g tem valores até duas ordens de grandeza maiores, elevando proporcionalmente a temperatura de operação.

Conclusões

Partindo de uma análise teórica via cálculos autoconsistentes, determinamos a distribuição eletrônica em amostras de poços quânticos parabólicos de AlGaAs/GaAs ao longo da direção de confinamento (direção de crescimento). O resultado nos possibilitou determinar o valor médio do fator g (valor esperado). Paralelamente, efetuamos medidas de transporte eletrônico sob a ação de um campo magnético de inclinação variável, a temperaturas da ordem de dezenas ou centenas de milikelvins, com as quais determinamos o valor da mesma grandeza. A comparação entre teoria e prática mostrou boa concordância, mesmo com a aplicação de campos elétricos estáticos externos (casos específicos para os quais também realizamos cálculos autoconsistentes). Quanto a esse aspecto, constatamos experimentalmente uma esperada variação do fator g médio com a alteração do campo elétrico. Os cálculos autoconsistentes de fato nos anteciparam esse fenômeno, e muito especialmente a mudança do sinal do fator g . Também identificamos a contribuição oriunda de efeitos de muitos corpos para o fator g de Landé.

Acreditamos que a mudança de sinal do fator g médio tenha sido o efeito causador de um desvio da linearidade em medidas de Hall que realizamos numa série de amostras. Descartando a possibilidade de um efeito Hall anômalo (próprio de materiais ferromagnéticos), e de um efeito de ocupação de múltiplas sub-bandas, interpretamos o fenômeno como conseqüente de um “efeito válvula de spin”, em que uma barreira de energia de Zeeman associada à variação do sinal do fator g dificulta o processo de “*spin flip*” dos elétrons.

A conjectura da existência de um tal efeito válvula de spin nos levou a idealizar um dispositivo spintrônico, o transistor válvula de spin de AlGaAs. Prescindindo do concurso de materiais ferromagnéticos, tal dispositivo operaria à base das variações do spin eletrônicas associadas à variação do fator g de Landé ao longo da estrutura.

REFERÊNCIAS

- [1] C. P. Williams, S. H. Clearwater, *Explorations in quantum computing*, Springer-Verlag, New York (1998)
- [2] M. I. Dyakonov, http://arxiv.org/PS_cache/cond-mat/pdf/0401/0401369.pdf (2004)
- [3] A. Mauger, C. Godart, *Physics Reports* **141**, 51 (1986)
- [4] H. Ohno, *Science* **281**, 951 (1998)
- [5] K. Sato, H. Katayama-Yoshida, *Semic. Sci. technol.* **17**, 367 (2002)
- [6] C. Ronning, E. P. Carlson, R. F. Davis, *Physics Reports* **351**, 349 (2001); S. O. Kucheyev, *Ion-beam processes in group-III nitrides*, tese de doutoramento, Australian National University, março de 2002
- [7] J. M. Baik, H. W. Jang, J. K. Kim, J. L. Lee, *Appl. Phys. Lett.*, **82**, 583 (2003); Y. Shon, Y. H. Kwon, Sh. U. Yuldashev, J. H. Leem, C. S. Park, D. J. Fu, H. J. Kim, T. W. Kang, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 1845 (2002)
- [8] H. H. Tan, J. S. Williams, J. Zou, D. J. H. Cockayne, S. J. Pearton, R. A. Stall, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 2364 (1996); H. H. Tan, C. Jagdish, J. S. Williams, J. Zou, D. J. H. Cockayne, A. Sikorski, *J. Appl. Phys.* **77**, 87 (1995)
- [9] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, D. Ferrand, *Science* **287**, 1019 (2000)
- [10] M. A. Boseli, I. C. da Cunha Lima, J. R. Leite, A. Troper, A. Ghazali, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 1138 (2004)
- [11] S. Nakamura, G. Fasol, *The blue laser diode*, (Springer, Berlin, 1997)
- [12] C. Liu, E. Alves, A. D. Siqueira, N. Franco, M. F. da Silva, J. C. Soares, *J. Appl. Phys.* **90**, 81 (2001); C. Liu, E. Alves, A. R. Ramos, M. F. da Silva, J. C. Soares, T. Matsutani, M. Kiuchi, *Nucl. Instr. Met. Phys. Res. B* **191**, 544 (2002); S. J. Pearton, M. E. Overberg, G. Thaler, C. R. Abernathy, N. Theodoropoulou, A. F. Hebard, S. N. G. Chu, R. G. Wilson, J. M. Zavada, A. Y. Polyakov, A. V. Osinsky, P. E. Norris, P. P. Chow, A. M. Wowchack, J. M. Van Hove, Y. D. Park, *J. Vac. Sci. Technol. A* **20** (3) 721 (2002); S. O. Kucheyev, J. S. Williams, C. Jagdish, J. Zou, G. Li, *Phys. Rev. B* **62**, 7510 (2000).
- [13] Ao que nos parece, até agora o único trabalho sobre implantação iônica em GaN cúbico é: J. Portmann, C. Haug, R. Brenn, T. Frey, B. Schöttker, D. J. As, *Nucl. Instr. Met. Phys. Res. B* **155**, 489 (1999)
- [14] C. Weisbuch, C. Hermann, *Phys. Rev. B* **15**, 816 (1977)
- [15] R. Jansen, O.M.J. Erve, S.D. Kim, R. Vlutters, P.S. Anil Kumar, J.C. Lodder, *J. Appl. Phys.* **89**, 7431 (2001)
- [16] W. Zawadzki, P. Pfeffer, *Semicond. Sci. Technol.* **19**, R1-R17 (2004)
- [17] C. A. Duarte, G. M. Gusev, A. A. Quivy, T. E. Lamas, J. C. Portal, *Physica E*, aceito para publicação em *Physica E*
- [18] G. Salis, Y. Kato, K. Ensslin, D.C. Driscoll, A.C. Gossard, D.D. Awschalom, *Nature* **414**, 619 (2001)
- [19] G.M. Gusev, C.A. Duarte, A.A. Quivy, T.E. Lamas, J.R. Leite, A.K. Bakarov, A.I. Toropov, *Phys. Rev. B* **71**, 165311 (2005)

- [20] S. Adachi, J. Appl. Phys. **58**, R1 (1985)
- [21] G.-Q. Hai, N. Studart, F. M. Peeters, Phys. Rev. B **52**, 8363 (1995); C. S. Sergio, *Transporte quântico em poços parabólicos largos*, tese de doutoramento, IFUSP (2003); I. R. Pagnossin, *Propriedades de transporte elétrico de gases bidimensionais de elétrons nas proximidades de pontos quânticos de InAs*, dissertação de mestrado, IFUSP (2004)
- [22] A. J. Rimberg, R. M. Westervelt, Phys. Rev. B **40**, 3970 (1989); C. S. Sergio, *op. cit.*; T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982)
- [23] S. Datta, H. Ahmad, M. Pepper, A. Broers, *Electronic transport in mesoscopic system* (Cambridge University Press, 1991)
- [24] L. Hedin, B. I. Lundqvist, J. Phys. C **4**, 2064 (1971); F. Stern, S. Das Sarma, Phys. Rev. B **30**, 840 (1984)
- [25] E. G. Gwinn, P. F. Hopkins, A. J. Rimberg, R. M. Westervelt, M. Sundaram, A. C. Gossard, Phys. Rev. B **41**, 10700 (1990); C. S. Sergio, *op. cit.*
- [26] <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/AlGaAs/basic.html>
- [27] A. J. Rimberg, R. M. Westervelt, *op. cit.*
- [28] E. G. Gwinn *et al.*, *op. cit.*
- [29] D. J. BenDaniel, C. B. Duke, Phys. Rev. **152**, 683 (1966)
- [30] M. P. Stopa, S. Das Sarma, Phys. Rev. B **47** 2122 (1993)
- [31] E. G. Gwinn *et al.*, *op. cit.*
- [32] A. J. Rimberg, R. M. Westervelt, *op. cit.*
- [33] P. F. Hopkins, A. J. Rimberg, E. G. Gwinn, R. M. Westervelt, M. Sundaram, A. C. Gossard, Appl. Phys. Lett. **57**, 2823 (1990)
- [34] C. M. Hurd, *The Hall effect in metals and alloys* (Plewnum, New York, 1972); D. C. Look, *Electrical Characterization of GaAs materials and devices* (John Wiley & Sons, New York, Chichester, England, 1992)
- [35] I. R. Pagnossin, *op. cit.*
- [36] K. V. Klitzing, G. Dorda, M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980)
- [37] A. Karlhede, S. A. Kivelson, S. L. Sondhi, *The quantum Hall effect: the article, lectures*, 9th Jerusalem Winter School on Theoretical Physics, janeiro de 1992
- [38] E. Zaremba, Phys. Rev. B **45**, 14143 (1992)
- [39] G.-Q. Hai *et al.*, *op. cit.*
- [40] M. E. Raikh, T. V. Shahbazyan, Phys. Rev. B **47**, 1522 (1993); M. E. Raikh, T. V. Shahbazyan, Phys. Rev. B **49**, 5531 (1994); G. M. Gusev, A. A. Quivy, J. R. Leite, A. A. Bykov, N. T. Moshegov, V. M. Kudryashev, A. I. Toropov, Yu. V. Nastaushev, Semic. Sci. Technol. **14**, 1114 (1999)
- [41] M.E. Raikh, T.V. Shahbazyan, *op. cit.*
- [42] D. R. Leadley, R. J. Nicholas, J. J. Harris, C. T. Foxon, Phys. Rev. B **58**, 13036 (1998); D. Schoenberg, *Magnetic oscillations in metals* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, England, 1984)

- [43] A. A. Abrikosov, *Fundamentals of the Theory of Metals* (North-Holland, Amsterdam, 1988)
- [44] M. Ahoujja, S. Elhamri, R. S. Newrock, D. B. Mast, W. C. Mitchel, I. Lo, A. Faithmulla, J. Appl. Phys **81**, 1609 (1997)
- [45] T. Ando, J. Phys. Soc. Japan: **36**, 1521 (1974); **37**, 622 (1974); **37**, 1233 (1974); T. Ando, Y. Matsumoto, Y. Uemura, M. Kobayashi, K. F. Komatsubara, J. Phys. Soc. Japan **32**, 859 (1972); T. Ando, Y. Uemura, J. Phys. Soc. Japan **36**, 959 (1974).
- [46] R. Kubo, S. J. Miyake, N. Hashitsume, Solid State Phys. **17**, 269 (1965)
- [47] T. Ando, Y. Matsumoto, *et al.*, *op. cit.*
- [48] R. R. Gerhardts, Z. Phys. B **21**, 275 (1975); Surf. Sci. **58**, 227 (1975)
- [49] D. R. Leadley *et al.*, *op. cit.*
- [50] T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern, *op. cit.*; G. Gobsch, D. Schulze, G. Paasch, Phys. Rev. B **38**, 10943 (1998). Ressaltamos que o parâmetro de alargamento nessas referências (AFS, GSP) são distintos, e relacionados por $\Gamma_{AFS} = \sqrt{2}\Gamma_{Gobsh}$
- [51] G. Gobsch *et al.*, *op. cit.*
- [52] R. Enderlein, N. J. M. Horing, *Fundamentals of semiconductor Physics and devices*, World Scientific (1997)
- [53] W. Zawadzki, P. Pfeffer, Semic. Sci. Technol. **19**, R1 (2004); P. Pfeffer, W. Zawadzki, Phys. Rev. B **72**, 35325 (2005)
- [54] C. Weisbuch, C. Hermann, *op. cit.*
- [55] D.R. Leadley, *et al.*, *op. cit.*
- [56] J. F. Janak, Phys. Rev. **178**, 1416 (1969)
- [57] T. Ando, Y. Uemura, J. Phys. Soc. Jpn. **37**, 1044 (1973)
- [58] R. J. Nicholas, R. J. Haug, K. v. Klitzing, G. Weimann, Phys. Rev. B **37**, 1294 (1988); A. Usher, R. J. Nicholas, J. J. Harris, C. T. Foxton, Phys. Rev. B **41**, 1129 (1990)
- [59] R. J. Nicholas *et al.*, *op. cit.*
- [60] I. L. Aleiner, L. I. Glazmann, Phys. Rev. B **52**, 11296 (1995)
- [61] A. Usher, Phys. Rev. B **41**, 1129 (1990); V. T. Dolgoplov, A. A. Shashkin, A. V. Aristov, D. Schmerek, W. Hansen, J. P. Kotthans, M. Holland, Phys. Rev. Lett. **79**, 729 (1997); D.R. Leadley *et al.*, *op. cit.*
- [62] R. J. Nicholas *et al.*, *op. cit.*; T. Ando, Y. Uemura, *op. cit.*; A. Schmeller, J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, K. W. West, Phys. Rev. Lett. **75**, 4290 (1995); D.R. Leadley *et al.*, *op. cit.*
- [63] R. Merlin, Solid State Commun. **64**, 99 (1987)
- [64] M. M. Fogler, B. I. Shklovskii, Phys. Rev. B **52**, 17366 (1995)
- [65] D.R. Leadley *et al.*, *op. cit.*
- [66] L. W. Wong, H. W. Jiang, E. Palm, W. J. Schaff, Phys. Rev. B **55**, R7343 (1997)
- [67] C. S. Sergio, *op. cit.*; I. R. Pagnossin, *op. cit.*

- [68] W. Geißelbrecht, U. Pfeiffer, A. Thränhardt, U. Klütz, A. C. Gossard, G. H. Döhler, J. Crystal Growth **201/202**, 163 (1999); S. M. Wang, T.G. Andersson, W. Q. Chen, U. Södervall, J. Thordson, J. Crystal Growth **135**, 455 (1994)
- [69] P. F. Hopkins, K. L. Campman, A. C. Gossard, J. Crystal Growth **127**, 798 (1993); S. M. Wang, G. Treideris, W. Q. Chen, T. G. Andersson, Appl. Phys. Lett. **63**, 61 (1993)
- [70] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (North-Holland, Amsterdam, 1965)
- [71] G. Gobsch *et al.*, *op. cit.*
- [72] R. J. Nicholas *et al.*, *op. cit.*
- [73] C. S. Sergio, *op. cit.*
- [74] M. P. Stopa, S. Das Sarma, Phys. Rev. B **40**, 10048 (1989) , E. G. Gwinn, R. M. Westervelt, P. F. Hopkins, A. J. Rimberg, M. Sundaram, A. C. Gossard, Phys. Rev. B **39**, 6260 (1989); G. M. Gusev, A. A. Quivy, T. E. Lamas, J. R. Leite, A. K. Bakarov, A. I. Toropov, O. Estibals, J. C. Portal, Phys. Rev. B **65**, 205316 (2002)
- [75] *Landau Level Spectroscopy*, G. Landwehr e E. I. Rashba (eds.), (Elsevier Science, Amsterdam, 1991)
- [76] E. Zaremba, *op. cit.*
- [77] C. M. Hurd, *The Hall effect in metals and alloys* (Plenum, New York, 1972)
- [78] J. Smith, Physica (Amsterdam) **21**, 877 (1955)
- [79] J. N. Chazalviel, I. Solomon, Phys. Rev. Lett. **29**, 1676 (1972)
- [80] C. Zhang, Y. Takahashi, Semic. Sci.Tech. **12**, 835 (1997); R. Merlin, Solid. State Commun. **64**, 99 (1987)
- [81] C. E. Hembree, B. A. Mason, A. Zhang, J. A. Slinkman, Phys. Rev. B **40**, 10647 (1992)
- [82] S. Datta, S. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990); S. Das Sarma, Amer. Sci. **89**, 516 (2001)
- [83] R. Sousa, S. Das Sarma, Phys. Rev. B **68**, 155330 (2003)
- [84] Y. Lin, J. Nitta, T. Koga, T. Akazaki, Physica E **21**, 656 (2004)

Anexos

Em sequência, apresentamos cópias dos quatro artigos publicados durante o período do doutorado (somente aqueles cujo assunto se liga diretamente ao título da tese):

1) Referentes aos estudos sobre PQW:

a) Fator g de Landé em PQW:

- C. A. Duarte, G. M. Gusev, A. A. Quivy, T. E. Lamas, J. C. Portal, *Electric field controlled g -factor in parabolic well determined by transport measurements*, aceito para publicação em Physica E (“*article in press*”)

b) Efeito Hall e efeito válvula de spin em PQW:

- C. A. Duarte, G. M. Gusev, A. A. Quivy, T. E. Lamas, *Spin valve effect and Hall resistance in a wide parabolic well*, Braz. J. Physics **36**, 488 (2006).

- G. M. Gusev, C. A. Duarte, A. A. Quivy, T. E. Lamas, J. R. Leite, A. K. Bakarov, A. I. Toropov, *Spin dependent Hall effect in a parabolic well with a quasi-three-dimensional electron gas*, Phys. Rev B, **71**, 165311 (2005)

2) Referente aos estudos da implantação de Mn^{+} em GaN cúbico:

- V. A. Chitta, J. A. Coaquira, J. R. L. Fernandez, C. A. Duarte, J. R. Leite, D. Schikora, D. J. As, K. Lischka, *Room temperature ferromagnetism in cubic GaN epilayers implanted with Mn^{+} ions*, Appl. Phys. Lett. **85**, 3777 (2004)

Electric field controlled g-factor in parabolic well determined by transport measurements

C.A. Duarte^{a,*}, G.M. Gusev^a, A.A. Quivy^a, T.E. Lamas^a, J.C. Portal^{b,c,d}

^a*Instituto de Física da Universidade de São Paulo, CP 66318, CEP 05315-970, São Paulo, SP, Brazil*

^b*GHMFL, BP-166, F-38042, Grenoble, Cedex 9, France*

^c*INSA-Toulouse, 31077, Cedex 4, France*

^d*Institut Universitaire de France, Toulouse, France*

Available online 24 April 2006

Abstract

The Shubnikov de Haas oscillations in 500 Å parabolic well are studied in the tilted magnetic field. The electric field displaces the electron wave function along Z-axis and leads to the strong variation of the average bare g-factor in such system. From the measurements of the filling factor ν_c at which the spin gap collapse occurs, we deduce the total Zeeman energy, which consists of the bare Zeeman energy and exchange-correlation term. By investigating of the variation of ν_c in tilted field we reliably extract the bare g-factor as a function of the gate voltage.

© 2006 Elsevier B.V. All rights reserved.

PACS: 73.21.FG; 72.20.My; 71.45.–d

Keywords: Shubnikov de Haas oscillations; Parabolic quantum well

1. Introduction

The main idea of the quantum computing is to replace the classical bit by the quantum bit, or qubit, a quantum two-level system, which can be thought of the spin-up and spin-down states of the electron in quantum dots [1]. However, the practical implementation of these ideas requires complete control and manipulation of an individual spin by applying the static magnetic field. Therefore, each spin must have an individual set of coils producing such fields, and each spin must be shielded from fields from other spins. This very challenging problem can be excluded, if we are able to manipulate with the electron g-factor, in particular its sign, by applying the electric field. In this case the direction of the spin polarization of electrons in individual dot can be varied by local electric field in the uniform external magnetic field.

Promising system providing effective control and manipulation with the electron spin is a remotely doped

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ parabolic quantum well, because the spin properties of such materials depend strongly on the Al composition x . In perpendicular magnetic field g-factor should be calculated by averaging the local g-factor along the Z-axis:

$$\langle g \rangle = \frac{1}{W} \int g(Z) |\Psi(Z)|^2 dZ, \quad (1)$$

where $\Psi(Z)$ is the electron wave function. Application of the strong perpendicular magnetic field leads to the Zeeman splitting of the Landau levels (LL), which is proportional to the average g-factor in parabolic well. Recently, spin precessions of 2D electron gas in 1000 Å parabolic well has been measured from photoluminescence as a function of the gate voltage [2]. The electric field displaces the electron wave function along Z-axis and leads to the strong variation of the average g-factor, and consequently, variation of the spin lifetime. This ability to tune the local electron g-factor allows to fabricate in principle a logic gate for quantum computing, however the existence of such spin-dependent property has not yet been studied by means of transport coefficients.

*Corresponding author. Tel.: +55 11 30917098.

E-mail address: celsoad@if.usp.br (C.A. Duarte).

In the present work, we studied Shubnikov de Haas oscillations in 500 Å parabolic well in the tilted magnetic field. It is well established that the spin splitting in 2D electron gas is determined by the bare Zeeman energy and exchange-correlation term. It has been shown [3] that the spin splitting collapses when energy separation of spin-up and spin-down levels is less than the LL broadening, which determined by the single particle relaxation time τ_s . Therefore, from measurements of the filling factor ν_c at which the spin gap collapse occurs, it is possible to extract the total Zeeman energy. From the other side, only the bare Zeeman part of the spin gap increases as the magnetic field is tilted. It allows to separate the bare Zeeman part and exchange term of the Zeeman energy. By investigating the variation of ν_c in tilted field we deduced the bare g-factor as a function of the external electric field.

2. Experimental results

The samples were made from $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ parabolic quantum wells grown by molecular beam epitaxy. It included a 500, 750 and 1000 Å-wide parabolic $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ wells with x varying between 0 and 0.20, bounded by undoped $\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ spacer layers with δ -Si doping on two sides [4]. The mobility of the electrons in our 500 Å wide well was $600 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ and the electron density $4.4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. The characteristic bulk density is given by equation $n_+ = \Omega_0^2 m^* \epsilon / 4\pi e^2$, where the parameter Ω_0 is associated to the parabolic variation of the potential in the well along the growth direction, $V(z) = \frac{1}{2} m^* \Omega_0^2 z^2$. The effective thickness of the electronic slab can be obtained from equation $W_{\text{eff}} = n_s / n_+$. For the $W = 500 \text{ Å}$ wide well, we calculate $W_{\text{eff}} = 80 \text{ Å} \ll W$, where W is the geometric width of the well. In this case, the density profile is sharply peaked. In the presence of an electric field the minimum of the confining potential is displaced with the center of the parabolic well, whereas the shape of the parabolic well and implicitly of the envelope of the wave function are conserved. This particular property of the partially filled parabolic well makes it suitable for the practical realization of the electronic devices based on the manipulation of the g-factor. Fig. 1 shows self-consistent calculations of the potential and the electron density profile across the sample in the absence and in the presence of the external electric field. The displacement of the electronic wave function with an applied electric field away from the center results to the strong modification of the average g-factor. Fig. 2 shows the variation of the g-factor with external electric field calculated by Eq. (1).

It is worth noting that the bulk Fermi energy in our system decreases with the width as $E_F = \hbar^2 (3\pi^2 n_+)^{2/3} / (2mW^{4/3})$ and does not depend on the electron sheet density. Since the characteristic energy of the square well $E_0 = (2\pi)^2 \hbar^2 / (8mW^2)$ decreases with the width more rapidly than the Fermi energy, we have 1, 2, and two subbands for 500, 750, and 1000 Å parabolic well, consequently. The test samples were Hall bars with the

Fig. 1. Calculated total potential and electron density for a 500 Å parabolic well for different electric fields ($\times 10^5 \text{ V/cm}$: 0.0 (thick line), 0.05 (dots), 0.1 (dashes), 0.15 (dot-dash), 0.2 (short dot), 0.3 (dash-dot-dot), 0.4 (short dash-dot), 0.55 (thin line)).

Fig. 2. Average g-factor of a 500 Å parabolic well as a function of the external electric field.

distance between the voltage probes $L = 500 \mu\text{m}$ and the width of the bar $d = 200 \mu\text{m}$. Four-terminal resistance R_{xx} and Hall R_{xy} measurements were made down to 50 mK in a magnetic field up to 15 T. The sample was immersed in a mixing chamber of a top-loading dilution refrigerator. The measurements were performed with an AC current not exceeding 10^{-7} A . We measured the magnetoresistance at different angles θ between the field and normal to the parabolic well plane, rotating our sample in situ. Below, we focus on the results obtained in 500 Å parabolic well. We also observe the variation of the g-factor with gate voltage in 750 and 1000 Å-wide wells, although the results require more complicated analysis, because these structures have two subbands occupied.

Fig. 3 shows the magnetoresistance of a 500 Å parabolic well as a function of magnetic field for different gate

Fig. 3. The magnetoresistance of a 500 Å parabolic well as a function of magnetic field for different gate voltages at $T = 150$ mK. Arrows show the minima in R_{xx} corresponding to the spin splitting.

voltages. We may see that the spin splitting minima are fully resolved at filling factors $\nu = 3, 5$ and 7 at zero gate voltage, however, becomes partially resolved at $\nu = 5$ and 7 , when external voltage is applied. Note that the amplitude of the SdH oscillations at low field is not changed with voltage, therefore the collapse of the spin splitting is not due to the increase of the level broadening. We also observe 10% increase of the electron density at $V_g = +5$ V. Since the minima are shifted to the higher field, naively, it is expected that the spin gap will be more open. Fig. 3 shows the opposite behavior. However, we show below that the collapse of the spin occurs mostly due to the decrease of the exchange energy. It has been shown [3,5] that the spin splitting collapses when the energy separation of spin-up and spin-down levels is less than the LL broadening, which determined by the single particle relaxation time τ_s . Therefore, from measurements of the filling factor ν_c at which the spin gap collapse occurs, it is possible to deduce the total Zeeman energy. It is worth noting that the spin-splitting maxima of the resistance is converging from a spacing $\delta\nu = |\nu_\uparrow - \nu_\downarrow| = 1$ at high field to $\delta\nu = 0$ at low field in the finite interval of B , and critical filling factor ν_c is not very well defined. In Ref. [3] ν_c is taken, where $\delta\nu = 0.5$ at $T = 0$. Since the experimental results were done at finite temperature we define ν_c at critical field when the depth of the minimum is less than 10% of the peak height, since the maxima start to converge rapidly for this value, as $\delta\nu$ collapses, and it is difficult to measure $\delta\nu < 0.5$ reliably, as a peak has a rather flat top.

As we already mentioned above, the spin splitting in 2D electron gas is determined by the bare Zeeman energy and exchange-correlation term:

$$\Delta_{\text{spin}} = g^* \mu_B B = g_0 \mu_B B + E_{\text{ex}}. \quad (2)$$

The bare Zeeman splitting is found to be 6–10 times smaller than the exchange-correlation energy. The critical filling factor can be obtained from the point where Δ_{spin} collapses.

In Ref. [3] it has been predicted that the exchange term is destroyed by disorder at a critical filling factor, when

$$g^* \mu_B B = \hbar/\tau_s = E_s. \quad (3)$$

Note that the bare Zeeman energy will remain at this point, however, it is much smaller than the level broadening, therefore Δ_{spin} collapses. It is worth noting that the bare Zeeman splitting depends on the total magnetic field, whereas the exchange-correlation energy depends on the perpendicular component of the magnetic field.

In the tilted magnetic field we should write [5]

$$\Delta_{\text{spin}} = g^* \mu_B B = g_0 \mu_B B + \alpha \hbar \frac{eB \cos \Theta}{m}, \quad (4)$$

since the exchange energy is given by $E_{\text{ex}} = \alpha \hbar \omega_c$, where $\omega_c = eB/mc$ is the cyclotron energy and parameter α can be extracted from the experiment. From Eq. (3) we estimate $\alpha \approx 0.16$ which is close to the value of $\alpha = 0.2$, which was obtained in Ref. [5]. Rearranging Eq. (3) in terms of the cyclotron energy at the point, when the spin splitting collapses, we obtain for dimensionless energy

$$E_{\nu_c}(\theta) = E_s \frac{1}{\hbar \omega_c} \left(\frac{m_0}{m} \right) = \left(\frac{g_0}{2 \cos \Theta} + \alpha \frac{m_0}{m} \right). \quad (5)$$

Now, we proceed to the experimental results in the tilted field. Fig. 4 shows the magnetoresistance traces for different tilt angle for $V_g = 0.0$ V. Arrows show the resistance maxima with partially resolved spin splitting. Note that the spin split minima are deeper and critical filling factor at which spin gap collapses increases at higher tilt angle. We attribute such behavior to the additional parallel component of the magnetic field at higher tilt angle, which results to the opening of the spin gap by the increasing of the bare Zeeman energy contribution. From the magnetoresistance traces shown in Fig. 4, we obtain the critical magnetic field at which spin splitting collapses and,

Fig. 4. The magnetoresistance of a 500 Å parabolic well as a function of magnetic field at $T = 150$ mK for different tilt angles (from the bottom trace to the top angle Θ varies from 0° to 85.1°), $V_g = 0$ V. Arrows show the minima in R_{xx} corresponding to the critical filling factors, when spin gap collapses.

Fig. 5. Variation of the dimensionless energy E_{vc} corresponding to the critical magnetic field at which spin gap collapses as a function of the tilt angle for different voltages. Solid lines are drawn from the prediction of Eq. (5).

consequently, the dimensionless energy E_{vc} as a function of the tilt angle. Fig. 5 shows E_{vc} versus $1/\cos\Theta$ for different gate voltages. From comparison with Eq. (5) we extract the bare g-factor. We may see that for zero gate voltage

g-factor is in good agreement with bulk value of 0.44. As expected, the slope of the line in Fig. 5 decreases with gate voltages, which corresponds to the decrease of the bare g-factor. Note that we are not able to change the sign of the g-factor in our samples. For this aim the parabolic $\text{Al}_x\text{Ga}_{x-1}\text{As}$ wells with $x = 0.06-0.1$ in the center of the well are more appropriated. Indeed, we attempt to grow such structures, however, they have much lower mobility due to the strong alloy scattering. Further progress in the growing of such material is necessary.

Acknowledgments

Support of this work by FAPESP, CNPq (Brazilian agencies) and USP-COFECUB is acknowledged.

References

- [1] D. Loss, D.P. DiVincenzo, Phys. Rev. A 57 (1998) 120.
- [2] G. Salis, Y. Kato, K. Ensslin, D.C. Driscoll, A.C. Gossard, D.D. Awschalom, Nature 414 (2001) 619.
- [3] M.M. Fogler, B.I. Shklovskii, Phys. Rev. B 52 (1995) 17366.
- [4] G.M. Gusev, A.A. Quivy, T.E. Lamas, J.R. Leite, O. Estibals, J.C. Portal, Phys. Rev. B 67 (2003) 15313.
- [5] D.R. Leadley, R.J. Nicholas, J.J. Harris, C.T. Foxon, Phys. Rev. B 58 (1998) 13036.

Spin Valve Effect and Hall Resistance in a Wide Parabolic Well

C. A. Duarte, G. M. Gusev, A. A. Quivy, and T. E. Lamas

Instituto de Física da Universidade de São Paulo, CP 66318, CEP 05315-970, São Paulo, SP, Brazil

Received on 4 April, 2005

We report observation of the Hall slope change in wide $Al_cGa_{1-c}As$ parabolic wells in the presence of a quasi-parallel magnetic field. Above the critical magnetic field $B > 4T$, the Hall resistance becomes temperature dependent and can be described by equation $R_{xy}/\cos\Theta \sim (B - B_0)/en_s$, where n_s is the electron density, $B_0 = 2.6$ T and Θ is the angle between magnetic field and the normal to the well plane. The effect strongly depends on the electron density; it is observed only in parabolic wells, which are almost completely filled by electrons. We attribute the Hall slope change to the unusual behaviour of the effective g factor in such parabolic well, which depends on the Al composition and changes the sign along the well width.

Keywords: Spin valve; Hall resistance; $Al_cGa_{1-c}As$ parabolic wells

I. INTRODUCTION

The Hall effect is very known and widely observed phenomenon in solid state physics. It arises from the Lorentz force that acts on a moving charge. The Hall resistance R_{xy} is described by the conventional equation

$$R_{xy} = -B/en_s \quad (1)$$

and offers a useful measure of the concentration n_s of the charge carriers in the sample. In two-dimensional system in the strong magnetic field and low temperature the Hall resistance exhibits a plateau, which equals to h/e^2 divided by an integer [1]. Another type of the Hall effect is an anomalous or extraordinary Hall effect discovered in ferromagnets almost 50 years ago [2]. It was found that the Hall resistivity in ferromagnets is larger than in nonmagnetic metals and can be fitted empirically by the formula $R_{xy} = R_0B + R_S M$, where B is applied magnetic field, R_0 is the ordinary Hall coefficient, and R_S is the anomalous Hall coefficient.

In the present work we report observation of the anomalous Hall slope change in wide parabolic wells in quasi-parallel magnetic field. For tilt angle $\Theta \leq 90^\circ$ and low temperature we found that the Hall resistance at $B > 4T$ increases its slope twice and becomes temperature dependent. The ordinary Hall effect recovers at high ($T = 50K$) temperature and perpendicular magnetic field.

II. EXPERIMENTAL RESULTS AND DISCUSSIONS

The samples were made from $Al_cGa_{1-c}As$ parabolic quantum well grown by molecular beam epitaxy. It included a 500, 750, 1000, 1500, 1700 and 2200 Å-wide parabolic $Al_cGa_{1-c}As$ wells with Al content varying between 0 and 0.29, bounded by undoped $Al_cGa_{1-c}As$ spacer layers with δ -Si doping on two sides [3]. The mobility of the electron gas in our samples was $\sim (100 - 250) \times 10^3 cm^2/Vs$ and density - $n_s = (2 - 4) \times 10^{11} cm^{-2}$, therefore our quantum wells were partially full with 2-5 subbands occupied. Four-terminal resistance R_{xx} and Hall R_{xy} measurements were made down to 1.5 K in a magnetic field up to 12 T. We rotate sample *in situ*, so that magnetic field could be tilted with respect to the sample

(x-y) plane in x or y directions. We denote the angle between B and the normal to the sample plane by Θ . The characteristic bulk density is given by equation $n_+ = \frac{\Omega_0^2 m^* \epsilon}{4\pi e^2}$. The effective thickness of the electronic slab can be obtained from equation $W_{eff} = n_s/n_+$. For partially filled quantum well W_e is smaller than the geometrical width of the well W . The mobility of the electron gas in our samples was $590 \times 10^3 cm^2/Vs$ for narrow wells and $\sim 200 \times 10^3 cm^2/Vs$ for wider parabolic wells. We varied the electron sheet density by illumination with a red light-emitting diode. The ratio between the effective thickness of the electronic slab and geometric width $f = W_{eff}/W$ was less than 0.3 for $W < 1000 \text{Å}$ parabolic wells. After illumination the effective thickness increases, however, the electron density is saturated, and quantum well still remains partially occupied. The energy spectrum of the full PQW is more similar to the square quantum well than to a harmonic potential.

Application of the strong perpendicular magnetic field leads to the Zeeman splitting of the Landau levels, which is proportional to the average g -factor in parabolic well. The effective g -factor in $Al_cGa_{1-c}As$ structures changes with composition [4]: $g(c) = -g_0 + g_1 c$, where $g_0 = 0.44$, and $g_1 = 2.7$. Therefore, g -factor increases monotonically from $g = -0.44$ (middle of the well) to $g = +0.4$ at the edge of the well ($c = 0.3$), and changes the sign at $c = 0.13$. Fig. 1 shows the variation of the g -factor in this parabolic well along z axis.

In perpendicular magnetic field g -factor should be calculated by averaging local g -factor along z -axis :

$$\langle g \rangle = \frac{1}{W} \int_{-W/2}^{W/2} g(z) |\Psi(z)|^2 dz, \quad (2)$$

where Ψ is the electron wave function. In the presence of the in-plane magnetic field, however, evolution of 2D to 3D energy spectrum is expected, because magnetic length becomes smaller than the sample width. In this case the states in the different parts of the well along z axis has the different spin polarization: the center of the well is almost antialigned spin and the edge of the well is almost all aligned spins (see Fig. 1a). It may lead to the suppression of the electron motion in z direction in crossed electric and magnetic fields, since the motion in z direction now requires the spin flip process, and, consequently to increase of the slope of the Hall effect in our case. Such effect is similar to the famous spin valve effect, which

leads to the giant magnetoresistance in multilayers and has already found important applications [5].

FIG. 1. Schematic view of the spin orientation of electrons in parabolic well in the presence of the strong in-plane magnetic field (a) and effective g-factor variation along z (b).

FIG. 2. The Hall(a) and diagonal (b) resistance of 2200Å wide parabolic well in quasi-parallel ($\Theta \approx 89.4^\circ$) magnetic fields, $T=4.2$ K. The curves (1) and (2) are measured before and after illumination. Open circles and squares show the equation 1, full circles show the equation 3.

Figure 2 shows longitudinal R_{xx} and Hall R_{xy} resistances of 2200Å -wide parabolic $Al_cGa_{1-c}As$ well at $\Theta \approx 89^\circ$ as a function of applied magnetic field before and after illumination. The magnetic field is directed along the current flow. Note that for this tilt angle magnetic field is almost parallel to the sample plane. We keep small perpendicular component

for Hall effect measurements. Indeed for completely parallel magnetic field no Hall effect is observed. We may see that the magnetoresistance reveals oscillations, sometimes called diamagnetic Shubnikov de-Haas (SdH) oscillations, which results from the combined effect of the electric and magnetic fields. In quantum well with several subbands occupied such oscillations are interpreted as magnetic depopulation of the two-dimensional levels.

FIG. 3. Calculated total potential and electron density in 2200Å parabolic well for two different densities n_s (10^{11}cm^{-2}): 1.3(a), 3(b).

Figure 2 shows that R_{xx} exhibits 3 oscillations, therefore 3 subbands are depopulated in this 2200Å -wide parabolic well. Before illuminations the Hall resistance is linear and can be described by equation 1. After illumination the behaviour of R_{xy} is dramatically changed: the Hall resistance demonstrates linear dependence on the magnetic field at low B , and at higher field, R_{xy} deviates from the former linear dependence, and its slope increases. Such anomalous behaviour at high field is described by equation

$$R_{xy}/\cos\Theta = -A \times (B - B_0)/n_s \quad (3)$$

where the value of B_0 depends on the sample width. We found that the coefficient A strongly depends on the temperature: it gradually increases, when temperature decreases, and becomes 2 times larger at $T=1.5$ K than at low field and high temperatures. In perpendicular magnetic field we found ordinary quantum Hall effect.

We attribute such large Hall slope to the spin valve effect in z direction, which also suppresses the motion in y -direction. Firstly, the Hall effect deviates from the ordinary slope at $B > 4$ T, when magnetic length becomes smaller than the well width, and local g -factor turns to be z -dependent. In lower field g -factor should be calculated by averaging local g -factor

along z -axis, given by equation 2. Secondly, the Hall slope change is observed in quasi-parallel magnetic field, since the strong in-plane field makes local g -factor variable along z -axis. The change in the Hall slope also occurs in the presence of multiple carrier types as the subbands are depopulated, however this change has opposite sign and can not explain our observation in quasi-parallel magnetic field. Finally, the Hall slope change is observed only in parabolic well, which is almost completely filled by electrons. In these samples the effective g -factor changes the sign across the well, which can lead to the spin-valve effect. In partially filled parabolic well the sign change of the g -factor along the z -direction does not occur, and Hall resistance is not affected by spin dependent transport. Fig. 3 shows charge distribution in parabolic quantum well before and after illumination. We see that the effective width of the electronic slab increases after illumination.

We also can vary the electron density by applying the voltage between the gate on the top of the sample and electron sheet.

Figure 4 shows the dependence of the diagonal and Hall resistance on the magnetic field for different gate voltages. We may see that the electron density decreases with negative gate voltage. Fig.5 demonstrates the behaviour of R_{xx} and R_{xy} in quasi-parallel magnetic field for different gate voltages.

The insert shows the ratio between the slope of the Hall resistance at low and high magnetic field as a function of the electron density. We may see that this ratio decreases with electron density decrease in accordance with our observation of the Hall slope change with illumination. However it is worth noting that the electric field in addition with depletion of the electron system may introduce the asymmetry and the shift of the wave function from the center of the parabolic well. We expect that the spin-valve effect will be larger for this experiments in comparison with the symmetric case.

We attribute the electron sheet density dependence or dependence of the Hall slope change on the width of the electronic slab to the spin valve effect in parabolic well. The magnitude of the Zeeman splitting in GaAs is -0.064 meV at $B=2.5$ T for electrons in the center of the sample. At the edge of the well g -factor is positive and the Zeeman energy has almost the same value, but opposite in the sign. Thus the spin flip process requires the energy 0.12 meV, which is comparable with temperature $T=1.6$ K, and therefore may lead to the significant spin-valve effect. For partially occupied parabolic wells with $f = W_{eff}/W < 0.3$ g -factor is varied between -0.2 and -0.44 , and does not change the sign. Indeed the spin-valve effect is not expected in this case, in accordance with our observation.

FIG. 4. The longitudinal and Hall resistance of the $2200\text{\AA}$ wide parabolic well as a function of magnetic field at $\Theta = 0^\circ$ for different gate voltages V_g (Volts): 0(thick line),2(dashes),4(dots),6(thin line),8(dashes-dots),10(dots-dots-dashes).

FIG. 5. The longitudinal and Hall resistance of the $2200\text{\AA}$ wide parabolic well as a function of magnetic field at $\Theta \approx 89.6^\circ$ for different gate voltages V_g (Volts): 0(thick line),1(dashes),2(dots),4(thin line). Open circles show the equation 1, squares show the equation 3. The insert shows the ratio between the slope of the Hall resistance at low and high magnetic field

III. CONCLUSION

We demonstrated that the variation of the g -factor along the well width is responsible for the Hall slope change in wide parabolic well in the presence of the strong in-plane magnetic field. We attribute such large Hall slope to the spin valve effect in z direction. Since in the tilted field the electronic motion in the z -direction and y -direction are strongly coupled, the transversal component of the conductance is suppressed, and Hall resistance grows.

Acknowledgments

Support of this work by FAPESP, CNPq (Brazilian agencies) is

acknowledged.

-
- [1] *The quantum Hall effect*, edited by R. E. Prange, S. M. Girvin, New York, 1990.
- [2] C. M. Hurd, *The Hall Effect in Metals and Alloys*, Plenum Press, New York, 1972.
- [3] G. M. Gusev, A. A. Quivy, T. E. Lamas, J. R. Leite, A. K. Bakarov, A. I. Toropov, O. Estibals, J. C. Portal, Phys. Rev. B, **65**, 205316 (2002).
- [4] C. Weisbuch, C. Hermann, Phys. Rev. B, **15**, 816 (1977).
- [5] G. A. Prinz, Science **282**, 1660 (1998); A. Wolf et al., ibid. **294**, 1488 (2001).

Spin-dependent Hall effect in a parabolic well with a quasi-three-dimensional electron gas

G. M. Gusev, C. A. Duarte, A. A. Quivy, T. E. Lamas, and J. R. Leite*

Instituto de Física da Universidade de São Paulo, CP 66318CEP 05315-970, São Paulo, SP, Brazil

A. K. Bakarov and A. I. Toropov

Institute of Semiconductor Physics, Novosibirsk, Russia

(Received 30 April 2004; revised manuscript received 17 November 2004; published 15 April 2005)

We study the Hall effect in wide $\text{Al}_c\text{Ga}_{1-c}\text{As}$ parabolic wells in the presence of the tilted magnetic field. The Hall resistance is described by equations $R_{xy}/\cos\Theta = -B/en_s$ at $B < 4$ T, and $R_{xy}/\cos\Theta = -A \times (B - B_0)/en_s$ at $B > 4$ T, where n_s is the electron density, $B_0 = 2 - 2.6$ T, A is the temperature dependent coefficient, and Θ is the angle between the magnetic field and the normal to the well plane. The effective g factor in such materials depends on the Al composition and changes the sign along the well width. In the presence of the strong tilted magnetic field electron moving along the z direction acquires a spin flip process, which is strongly suppressed at low temperatures, and leads to the change of the Hall effect slope.

DOI: 10.1103/PhysRevB.71.165311

PACS number(s): 73.21.Fg, 72.20.My, 71.45.-d

I. INTRODUCTION

The electron spin is a subject of intense current investigation in the area of spintronics—a new and very promising direction of research that may have important practical applications in microelectronics. Manipulation with the electron g factor, in particular its sign, is an effective method to vary the direction of the spin polarization of electrons, which is the key factor in spintronics.

A promising system providing effective control and manipulation with the electron spin is a remotely doped $\text{Ga}_{1-c}\text{Al}_c\text{As}$ parabolic quantum well,^{1,2} because the spin properties of such materials depend strongly on the Al composition c . Assuming as [001] the growth direction, and taking as $z=0$ the position of the pure GaAs material, an effective harmonic potential is given by $U = m\Omega^2 z^2/2$ with $\Omega = a(2/m)^{1/2}$ and effective mass m , when a composition profile $c(z) = az^2$ is achieved. The effective g factor changes with composition:³ $g(c) = -g_0 + g_1 c$, where $g_0 = 0.44$, and $g_1 = 2.7$. Therefore, the g factor increases monotonically from $g = -0.44$ (middle of the well) to $g = +0.4$ at the edge of the well ($c = 0.3$), and changes sign at $c = 0.13$. Figure 1 shows the variation of the g factor in this parabolic well along the z axis. An application of the strong perpendicular magnetic field leads to the Zeeman splitting of the Landau levels, which is proportional to the average g factor in the parabolic well. Recently spin precession of two-dimensional (2D) electrons in a 1000 Å parabolic well in a perpendicular magnetic field has been measured from photoluminescence as a function of the gate voltage.⁴ The electric field displaces the electron wave function along the z axis and leads to the strong variation of the average g factor, and consequently, variation of the spin lifetime. This ability to tune the local electron g factor allows us to fabricate, in principle, the spin valve transistor or other spintronic devices, however, the existence of such a spin-dependent property has not been studied yet in transport coefficients. Only the recently spin-related quantum Hall ferromagnets at Landau filling factor $\nu = 2$ have been studied in wide (1000–3000 Å) parabolic wells from magnetotransport measurements.⁵

In the present work we study the Hall effect in wide parabolic wells in a quasiparallel magnetic field. For tilt angle $\Theta \leq 90$ deg and low temperature we found that the Hall resistance at $B > 4$ T increases its slope twice and becomes temperature dependent. The ordinary Hall effect recovers at high ($T = 50$ K) temperature and perpendicular magnetic field. We attribute the Hall slope change in our parabolic well to the unusual spin properties. In strong parallel magnetic field, when the cyclotron diameter becomes smaller than the well width, the spectrum turns on the spectrum of the three-dimensional (3D) gas⁶ in the quantum limit with local g -factor variable along z . Moreover, the local effective g factor in such a structure changes sign along the well width. The ordinary Hall effect arises from the Lorentz force that acts on a moving charge. In the tilted magnetic field, an electron in the parabolic well moves in the y (perpendicular to the current flow) and z directions. However, the motion in the z direction requires a spin flip process, which is suppressed in

FIG. 1. The effective g factor (a) and variation of the band (b) along the z direction for a 4000 Å-wide parabolic quantum well with composition $c=0$ and $c=0.29$ at the center and the edge of the well, respectively.

TABLE I. The sample parameters.

Sample	Spacer (Å)	W (Å)	n^+ (10^{16} cm^{-3})	n_s (dark) (10^{11} cm^{-2})	W_{eff} (Å)	μ (dark) ($\text{cm}^2/\text{V s}$)	n_s (after illumination) (10^{11} cm^{-2})	W_{eff} (Å)	μ (after illumination) ($\text{cm}^2/\text{V s}$)
2537	250	500	47.6	4.4	92.4	590 000	6.4	133	440 000
2536	250	750	21	4.4	210	322 000	6.0	290	302 000
2577	200	1000	11.9	4.2	353	90 000	5.9	495	210 000
2579	300	1000	11.9	4	340	131 000	6.0	510	185 000
2580	400	1000	11.9	3.4	285	232 000	4.8	403	342 000
2496	200	1500	5.3	3.5	650	150 000	5.5	1040	220 000
2535	200	1700	4.1	3.2	784	220 000	5.0	1225	200 000
2534	150	2200	2.7	3.1	1150	186 000	5.0	1850	180 000
AG662	100	4000	0.88	1.5	1700	120 000	3.5	4000	240 000

the case of the small spin-orbit interaction. Since in the tilted field the electronic motion in the z direction and y direction are strongly coupled, the transversal component of the conductance is suppressed, and Hall resistance grows.

II. EXPERIMENTAL RESULTS

The samples were made from a $\text{Ga}_{1-c}\text{Al}_c\text{As}$ parabolic quantum well grown by molecular-beam epitaxy. It included a 500, 750, 1000, 1500, 1700, 2200 and 4000 Å-wide parabolic $\text{Ga}_{1-c}\text{Al}_c\text{As}$ well with the Al content varying between 0 and 0.29, bounded by undoped $\text{Ga}_{1-c}\text{Al}_c\text{As}$ spacer layers with δ -Si doping on two sides.⁶ The characteristic bulk density is given by equation $n_+ = \Omega_0^2 m^* \epsilon / 4\pi e^2$. The effective thickness of the electronic slab can be obtained from the equation $W_{eff} = n_s / n_+$. For a partially filled quantum well, W_e is smaller than the geometrical width of the well W . The mobility of the electron gas in our samples was $590 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{V s}$ for narrow wells and $\sim 200 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{V s}$ for wider parabolic wells. We varied the electron sheet density by illumination with a red light-emitting diode. The summary of the sample parameters are shown in Table I. We see that before illumination our quantum wells were partially full with 2–5 subbands occupied. The ratio between the effective thickness of the electronic slab and geometric width $f = W_{eff}/W$ was less than 0.3 for $W < 1000$ Å parabolic wells. After illumination the effective thickness increases, however, the electron density is saturated, and the quantum well still remains partially occupied (see Table I). We are able to obtain the ratio $f=1$ only for a 4000 Å wide sample. The energy spectrum of the full PQW is more similar to the square quantum well than to a harmonic potential.

The test samples were Hall bars with the distance between the voltage probes $L=200 \mu\text{m}$ and the width of the bar $d=100 \mu\text{m}$. Four-terminal resistance R_{xx} and Hall R_{xy} measurements were made down to 1.5 K in a magnetic field up to 12 T. The current was directed along the Hall bar (x axis). We rotate sample *in situ*, so that the magnetic field could be tilted with respect to the sample (x – y) plane in x or y directions. We denote the angle between B and the normal to the sample plane by Θ .

Figure 2 shows longitudinal R_{xx} and Hall R_{xy} resistances of 4000 Å-wide parabolic $\text{Ga}_{1-c}\text{Al}_c\text{As}$ as well as at $\Theta \approx 89$ deg as a function of the applied magnetic field for different temperatures. The sample was illuminated in order to approach wider width of the electronic slab. The magnetic field is directed along the current flow. We may see that the magnetoresistance reveals oscillations, sometimes called diamagnetic Shubnikov de-Haas (SdH) oscillations, which result from the combined effect of the electric and magnetic fields. In a quantum well with several subbands occupied, such oscillations are interpreted as the magnetic depopulation of the two-dimensional levels. Figure 2 shows that R_{xx} exhibits 5 oscillations, therefore 5 subbands are depopulated in this 4000 Å-wide parabolic well. When the temperature increases, the oscillations are smeared out, and only the minimum corresponding to the depopulation of the last Landau level is seen. The Hall resistance demonstrates linear dependence on the magnetic field at low B , and at a higher field, R_{xy} deviates from the former linear dependence, and its slope

FIG. 2. Diagonal and Hall resistances of the 4000 Å wide parabolic well as a function of the magnetic field at tilt angle $\Theta \approx 89.1$ deg for different temperatures: 1.5 K, 4.2 K, 10 K, 15 K, 20 K, 30 K, 50 K. Top—geometry of the experiment.

FIG. 3. The longitudinal and Hall resistance of the 1500 Å wide parabolic well as a function of the magnetic field at $\Theta \approx 89.6$ deg for different temperatures. Curves 1 (solid for $T=1.5$ K, dashed for $T=30$ K) show magneto-resistance, when the magnetic field is directed parallel to the current flow. Curves 2 (solid for $T=1.5$ K, dashed for $T=30$ K) show magneto-resistance, when the magnetic field is directed perpendicular to the current flow. Hall resistance is shown for $T=1.5$ K (solid) and $T=30$ K (dashes). Top—geometry of the experiment.

increases. Such anomalous behavior is observed only at a low temperature, at $T=30$ – 50 K, R_{xy} is recovered and demonstrates ordinary behavior. Figure 3 shows the magneto-resistance and Hall effect for a 1500 Å-wide parabolic well for two different temperatures and orientations of the current and magnetic field. In this samples we have 4 subbands occupied, as we may see from Shubnikov de Haas oscillations at a low magnetic field. Figure 3 shows also that the amplitude of the magneto-oscillations for geometry, when the magnetic field was directed parallel to the current flow (curves 2), is smaller than for the magnetic field directed perpendicular to the current (curves 1), in accordance with theory for 3D SdH oscillations.⁷ Hall resistance in this sample at high magnetic field $B > 4$ T also deviates from a low-field slope and becomes temperature dependent. It is worth noting that this anomalous behavior does not depend on the orientation of the magnetic field and current flow. Indeed, we check it for 1500 and 4000 Å-wide parabolic wells and found similar behavior. Figure 4(a) shows the Hall resistance for 4000 Å-wide parabolic well in details. At relatively high ($T=30$ – 50 K) temperatures in a quasiparallel magnetic field we observed a linear Hall effect (curves 1), described by a conventional equation,

$$R_{xy}/\cos \Theta = -B/en_s, \quad (1)$$

where e is the electron charge. At low ($T=1.5$ K) temperature we found that for a magnetic field B below 4.2 T Hall resistance is not changed, however, for $B > 4.2$ T it demonstrates unusual behavior [curve 2 in Fig. 4(a)], which may be described by the equation

FIG. 4. The Hall resistance of a 4000 Å-wide parabolic well at $\Theta \approx 89.1$ deg as a function of the magnetic field at $T=50$ K (1) and $T=1.5$ K (2). Dashes show Eq. (2). (b) The ratio between the slope of the Hall resistance at a low and high magnetic field as a function of temperature for two samples.

$$R_{xy}/\cos \Theta = -A \times (B - B_0)/en_s, \quad (2)$$

where $B_0=2$ T, and A is the temperature-dependent coefficient. The Hall slope $R_H = \Delta R_{xy}/\Delta B$ gradually increases, when the temperature decreases, and becomes 2 times larger at $T=1.5$ K than at a low field and high temperatures [Fig. 4(b)].

Figure 5 shows experimental traces of the diagonal and Hall resistances for samples with different width W . All samples were illuminated. It is worth noting that the bulk Fermi energy in our system decreases with the width as $E_F = \hbar^2(3\pi^2 n_s)^{2/3}/(2mW^{4/3})$ and does not depend on the electron sheet density. Since the characteristic energy of the square well $E_0 = (2\pi)^2 \hbar^2/(8mW^2)$ decreases with the width

FIG. 5. The longitudinal and Hall resistance as a function of the magnetic field for various parabolic wells: (a) 500 Å ($n_s=6.4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\Theta \approx 89.7$ deg); (b) 1000 Å ($n_s=6.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\Theta \approx 89$ deg); (c) 1700 Å ($n_s=5.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\Theta \approx 89.4$ deg); (d) 2200 Å ($n_s=5.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\Theta \approx 88.6$ deg), $T=1.6$ K. Dashes show Eq. (1).

FIG. 6. The Hall resistance of a 2200 Å-wide parabolic well in quasiparallel ($\Theta \approx 89.4$ deg) (a) and perpendicular (b) magnetic fields, $T=4.2$ K. The curves (1) and (2) are measured before and after illumination (see Table I). Open circles and squares show Eq. (1); full circles show Eq. (2).

more rapidly than the Fermi energy, we have 2, 2, 3 and 4 subbands for 500, 1000, 1700 and 2200 Å parabolic well, consequently. Magnetoresistance oscillations in Fig. 5 are resulting from the depopulation of these subbands in a quasi-parallel magnetic field. We may see that the Hall slope change ΔR_H is observed only in wide parabolic wells with width $W > 1500$ Å. Note that in the PQW with a width smaller than 1000 Å electrons occupy only central part of the well and the ratio $f = W_{eff}/W$ is less than 0.3 even after illumination.

As we already mentioned previously, the width of the electronic slab increases after illumination. This particular property of the parabolic well makes it suitable for the practical realization of the electronic devices based on the manipulation of the average g factor. We checked the dependence of the Hall slope R_H in the perpendicular and quasiparallel magnetic field on the electron density. Figures 6 and 7 show such Hall slopes for two samples with different width W before and after strong illumination. We may see that the Hall effect is linear before illumination for both samples and field configurations. After illumination the behavior of the Hall resistance in a quasiparallel field is dramatically changed: the low field slope decreases in accordance with Eq. (1), which corresponds to an increase of the electron sheet density, however, at $B > 4.2$ T the Hall slope is changed and described by Eq. (2). In a perpendicular magnetic field we observed the conventional behavior of the Hall resistance for a 4000 Å width well. For a 2200 Å width parabolic well the Hall slope decreases at a high field. We will discuss the Hall slope change in the perpendicular field in the next section. Here we only emphasize the difference in the Hall slope behavior in quasiparallel and perpendicular magnetic fields. Such an observation justifies that increase of R_H , which is shown in Figs. 2–4, is due to the presence of the strong in-plane magnetic field.

Figure 8 shows the Hall effect for a 1500 Å width parabolic well after illumination for different tilt angles. We may see that the Hall slope change is observed only in a quasi-

FIG. 7. The Hall resistance of a 4000 Å-wide parabolic well in quasiparallel ($\Theta \approx 89.4$ deg) (a) and perpendicular (b) magnetic fields, $T=4.2$ K. The curves (1) and (2) are measured before and after illumination (see Table I). Open circles and squares show Eq. (1), triangles show Eq. (2).

parallel magnetic field. Indeed we checked that the angle is not changed during the magnetic field sweep, since even a small angle variation ($\theta \sim 0.1$ deg) may lead to a 1.6 times change in the Hall slope. For this aim we measure the Hall resistance in the narrow square GaAs quantum well and heterostructures $\text{Ga}_{1-c}\text{Al}_c\text{As}/\text{GaAs}$ during the same sweep of the magnetic field and find the conventional linear behavior. We also measure PQW in an almost parallel magnetic field, when Hall resistance approaches ~ 10 Ohms, which corresponds to the tilt angle ~ 89.97 deg. For this tilt angle the same angle variation $\theta \sim 0.1$ deg leads to 4.3 times change in the Hall slope. We do not find this large R_H variation, and the behavior of the Hall slopes is similar to behavior at $\Theta \approx 89.7$ deg, however, Hall traces are much more noisy and less reliable. We also believe that density and width depen-

FIG. 8. Normalized Hall resistance at $\Theta \approx 89.6$ deg (1) and at $\Theta=0$ (solid curve 2) as a function of the magnetic field, $T=1.5$ K. Dashes are the normalized Hall resistance at $\Theta \approx 89.6$ deg as a function of the magnetic field at $T=50$ K. Dots show Eq. (2). (b) The ratio between the slope of the Hall resistance at the low and high magnetic field as a function of tilt angle Θ .

dence measurements, which are shown in Figs. 5–7 justify that the angle is not changed during the magnetic field sweep.

III. THE HALL EFFECT IN A QUASI-TWO-DIMENSIONAL SYSTEM WITH SEVERAL SUBBANDS

It is well known that the presence of multiple carrier types (i.e., in the different subbands) with different mobilities causes changes in the Hall coefficient. In the case of the two subbands populated, the Hall resistance is given by the formula⁸

$$R_{xy} = - \frac{\langle \mu^2 \rangle + (r\mu_1\mu_2 B)^2}{\langle \mu \rangle^2 + (r\mu_1\mu_2 B)^2} \frac{B}{en_s}, \quad (3)$$

where $\mu_i = e\tau_i/em^*$ ($i=1,2$) is the subband mobility, τ_i is the transport scattering time, r is a factor depending on the intersubband scattering, which is 1, for two independent conduction channels. The average mobility is defined as

$$\langle \mu \rangle = \frac{n_1\mu_1 + n_2\mu_2}{n_1 + n_2}, \quad (4)$$

where n_i is the subband density ($i=1,2$), with a similar definition of $\langle \mu^2 \rangle$. It is worth determining the limiting values for the Hall slope R_H :

$$R_H(0) = - \frac{\langle \mu^2 \rangle}{\langle \mu \rangle^2} \frac{1}{en_s} \quad (5)$$

and

$$R_H(\infty) = - \frac{1}{en_s}. \quad (6)$$

Since $\langle \mu^2 \rangle > \langle \mu \rangle^2$, the Hall slope in the low field is larger than the Hall slope in a strong magnetic field. It is valid for any value of factor r , however, for $r < 1$ the crossover from low to high field behavior may occur at a higher magnetic field than for $r=1$. In the quantum wells with three subband occupancy the situation is more complicated. We obtained the following equation for Hall resistance:

$$R_{xy} = - \frac{c_1 + c_2 B^2 + c_3 B^4}{c_4 + c_5 B^2 + c_3 B^4} \frac{B}{en_s}, \quad (7)$$

where c_i are parameters depending on the mobility and density of electrons in the each subband. Indeed we find that the Hall slope in low field $R_H(0)$ is larger than the Hall slope in strong magnetic field $R_H(\infty) = -1/en_s$ as in the case of the two subband occupancy. We may conclude here that it is valid for all quantum wells with multiple subband occupancy.

Let us focus on the experimental data. Figures 6(b) and 7(b) show the Hall resistance in a low perpendicular magnetic field for different electron densities and geometrical width. We find that after illumination of a 2200 Å-wide parabolic well the third subband in this sample becomes populated. Before illumination this parabolic well has only two occupied subbands, and we may see in Fig. 6(b) that $R_H(0)$

$= R_H(\infty)$. When the third subband starts to become occupied, the Hall slope in a low field is changed and we obtain $R_H(0) > R_H(\infty)$ in accordance with Eq. (6). In principle we can fit the data in Fig. 6(b), magnetoresistance data and zero field conductivity, and deduce transport mobilities for each subbands. The electron sheet density for each subband is extracted from an analysis of the Shubnikov de Haas oscillations frequency. The detailed analysis of the magnetotransport results in quantum well with three subband occupancy will be done in a forthcoming publication. It should be emphasized here that the behavior of the Hall resistance in a quasiparallel magnetic field is completely different from $R_{xy}(B)$ in a perpendicular magnetic field. It is clear that the Hall slope in a perpendicular field $R_H(0)^\perp > R_H(\infty)^\perp$, on the other hand, in the quasiparallel magnetic field $R_H(0)^\parallel < R_H(\infty)^\parallel$. Naively, the opposed B dependence of the Hall slope was expected. First, the in-plane field leads to the depopulation of the subbands, therefore at the field corresponding to the onset of the depopulation of the last subband ($B_c > 2.5$ T for a 2200 Å wide well) conventional Hall slope $R_H(\infty)^\parallel = -1/en_s$ should be observed. Second, as in the perpendicular field case, the crossover from low to high field behavior leads to the change of the Hall slope from $R_H(0)$ to $R_H(\infty) = -1/en_s$. However, this crossover depends on the perpendicular component of magnetic field $B_\perp$, and in accordance with Fig. 6(b) occurs at $B_\perp = 0.2$ T. This value corresponds to $B_0 = 20$ T for tilt angle $\Theta \approx 89.4$ deg, which is much larger than the crossover magnetic field $B_0 = 2$ T obtained in the experiment [Fig. 6(a)]. Therefore we may conclude here that the changes in the Hall slope due to multiple subband occupancy and subband depopulation cannot provide a conventional explanation for our observation in quasiparallel magnetic field.

Note that in Fig. 6(a) $R_H(0)^\parallel = R_H(\infty)^\parallel = -1/en_s$. We expect that for a quantum well with multiple subband occupancy in the low field $R_H(0)^\parallel = R_H(0)^\perp$, which disagrees with our observations. It may be explained by the fast depopulation of the third subband, which already occurs in a low field, and in the interval $0.2 \text{ T} < B < 2.5 \text{ T}$ only two subbands (or one) are occupied. Since for two subband occupancy we find $R_H(0) = R_H(\infty)$ [see Fig. 6(b), curve 1], therefore the low field Hall slope in a quasiparallel magnetic field is determined by the conventional formula $R_H(0)^\parallel = -1/en_s$.

Figure 7 shows the Hall resistance for a 4000 Å wide well, which has 4 subband occupancy before illumination and 7–8 occupancy after illumination. We may see that in a perpendicular field the Hall slope is not changed with the magnetic field increase. It seems reasonable, because in the three-dimensional limit we expect the conventional value of the Hall slope $R_H = -1/en_s$ for all intervals of the magnetic field. In a quasiparallel magnetic field we find $R_H(0)^\parallel < R_H(\infty)^\parallel$ and $R_H(0)^\parallel = R_H(0)^\perp = -1/en_s$. Again, as for a 2200 Å-wide parabolic well, we cannot explain this effect by multiple subband occupancy and subband depopulation in a quasiparallel magnetic field.

IV. SPIN-DEPENDENT TRANSPORT IN A WIDE PARABOLIC WELL

We attribute the Hall slope change to the unusual spin properties of our system. This effect is different from the

extraordinary Hall effect discovered in ferromagnets almost 50 years ago.⁹ It was found that the Hall resistivity in ferromagnets is larger than in nonmagnetic metals and can be fitted empirically by the formula $R_{xy} = R_0 B + R_S M$, where B is applied magnetic field, R_0 is the ordinary Hall coefficient, and R_S is the anomalous Hall coefficient. The magnitude of the anomalous Hall coefficient depends on the various parameters of the material and its structure. For example, the magnitude of R_S is extremely large in amorphous ferromagnetics, it can be larger than R_0 by a factor of a 100 to a 1000, and may have the opposite sign. The asymmetric scattering of electrons by magnetic atoms may lead to the anomalous Hall voltage in ferromagnetic samples.

It is now accepted that two main mechanisms are responsible for such an effect: the skew-scattering proposed in the work of Ref. 9, and the side jump proposed in Ref. 10. We should mention that in these models the carriers are assumed to be magnetic and the scattering centers nonmagnetic. Indeed the result should be the same, when the situation is reversed. For a skew-scattering model the plane wave is scattered by impurity in the presence of the spin-orbit coupling. In such a situation the amplitude of the wave packet becomes anisotropic and depends on the spin. The average trajectory of an electron is deflected by a spin-dependent angle, which is typically of order 10^{-2} rad. For the side jump mechanism the center of the wave packet is shifted during the scattering, and this shift is also spin dependent. The typical lateral displacement during this process is 10^{-13} cm. It is worth noting that the deflection of the electron trajectory is very small, however, we can explain the large magnitude of R_S in an amorphous ferromagnet by a large number of scatterers, since practically every atom scatters the electron. Until recently, the anomalous Hall effect has been intensively studied only in magnetic structures.¹¹ In nonmagnetic semiconductors the anomalous Hall effect is very small, and can be separated from the ordinary Hall effect by magnetic resonance of the conduction electrons.¹² In InSb the Hall angle was found to be 3×10^{-4} rad, which is 4 orders of magnitude smaller than the angle for the normal Hall effect.

In our parabolic well the Hall slope change is completely different from the anomalous Hall effect. First, it has the same magnitude as an ordinary Hall effect. Second, in parabolic wells the dependence of the Hall resistance on a magnetic field is different from the Hall effect in ferromagnets: the slope of the Hall resistance at a higher field is larger than the slope at low B and depends on the temperature. In ferromagnets the slope at a higher field is determined by the ordinary Hall coefficient and usually it is smaller than an anomalous slope at low B .

We cannot ascribe the Hall effect in a parabolic well by the mechanism of the spin-dependent scattering described above, however, we suggest another explanation. As we already mentioned above, the effective g factor in such a structure changes the sign along the well width [see Fig. 1(a)]. In a strong quasiparallel magnetic field the magnetic length becomes smaller than the sample width. In this case the states in the different parts of the well along the z axis has different spin polarization: the center of the well is almost antialigned spin and the edge of the well is almost all aligned spins. It may lead to the suppression of the electron motion in the z

direction in crossed electric and magnetic fields, since the motion in the z direction now requires the spin flip process. Such an effect is similar to the famous spin valve effect, which leads to the giant magnetoresistance in multilayers and has already found important applications. It should be emphasized here that the electron sheet density dependence or dependence of the effect on the width of the electronic slab just confirms our explanation. The magnitude of the Zeeman splitting in GaAs is -0.064 meV at $B=2.5$ T for electrons in the center of the sample. At the edge of the well the g factor is positive and the Zeeman energy has almost the same value, but is opposite in sign. Thus the spin flip process requires energy of 0.12 meV, which is comparable with temperature $T=1.6$ K, and therefore may lead to a significant spin-valve effect. For partially occupied parabolic wells with $f = W_{eff}/W < 0.3$ ($W=500$ Å, 750 Å, 1000 Å and all samples before illumination) the g factor is varied between -0.2 and -0.44 , and does not change the sign. Indeed the spin-valve effect is not expected in this case, in accordance with our observation.

We now turn to the more qualitative description of the Hall effect in our structures. The problem of quasi-two-dimensional electrons in a tilted magnetic field has been solved for a parabolic well by Meriln in his paper.¹³ It is worth noting that spin splitting in the magnetic field was neglected.

The conductivity of electrons in a parabolic well in the presence of the tilted magnetic field is given by matrix

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & -\sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

We consider the case when the magnetic field is tilted in the x direction. Before the calculation of the conductivities σ_{ij} we need to perform the following transformation of x and z coordinates: $x = X \cos \alpha - Z \sin \alpha$, $z = X \sin \alpha + Z \cos \alpha$. The angle of rotation α is different from the tilt angle Θ between the field and normal to the parabolic well plane z and is given by the formula

$$\tan(2\alpha) = (\hbar\Omega)(\hbar\omega_c) \sin \Theta / [(\hbar\Omega)^2 - \hbar\omega_c]^2]. \quad (9)$$

In this new XyZ frame the energy of the electrons in a parabolic quantum well in a tilted magnetic field can be expressed analytically:¹³

$$E = \hbar\omega_1(n_\alpha + 1/2) + \hbar\omega_2(n_\beta + 1/2), \quad (10)$$

where

$$\omega_1 = (\Omega_Z^2 + \Omega^2 \cos^2 \alpha)^{1/2},$$

$$\omega_2 = (\Omega_X^2 + \Omega^2 \cos^2 \alpha)^{1/2},$$

$$\Omega_Z = \omega_Z \cos \alpha - \omega_X \sin \alpha,$$

$$\Omega_X = \omega_X \cos \alpha + \omega_Z \sin \alpha,$$

$\omega_c = eB/mc$, $\omega_Z = \omega_c \cos \Theta$, $\omega_X = \omega_c \sin \Theta$, and n_α and n_β are integers. Therefore we know the energy spectrum and electron wave functions in a parabolic well. With this knowledge

it is possible to calculate transport coefficients employing the self-consistent Born approximation in an XyZ frame.¹⁴ The conductivity tensor in this frame is given by the matrix

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma'_{XX} & \sigma'_{Xy} & 0 \\ -\sigma'_{Xy} & \sigma'_{yy} & \sigma'_{yz} \\ 0 & -\sigma'_{yz} & \sigma'_{ZZ} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

All conductivity components can be obtained analytically at zero temperature.¹⁴

$$\sigma'_{XX} = \frac{n_s e}{m} \frac{\gamma}{\omega_1^2 + \gamma^2}, \quad (12)$$

$$\sigma'_{ZZ} = \frac{n_s e}{m} \frac{\gamma}{\omega_2^2 + \gamma^2}, \quad (13)$$

$$\sigma'_{yy} = \frac{n_s e \Omega_Z^2}{m \omega_1^2} \frac{\gamma}{\omega_1^2 + \gamma^2} + \frac{n_s e \Omega_X^2}{m \omega_2^2} \frac{\gamma}{\omega_2^2 + \gamma^2}, \quad (14)$$

$$\sigma'_{Xy} = \frac{n_s e \Omega_Z}{m \omega_1^2} + \frac{\Omega_Z}{\omega_1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{dE} \frac{\gamma(E)}{\omega_c} \sigma'_{XX} dE, \quad (15)$$

$$\sigma'_{yz} = \frac{n_s e \Omega_X}{m \omega_2^2} + \frac{\Omega_X}{\omega_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{dE} \frac{\gamma(E)}{\omega_c} \sigma'_{ZZ} dE, \quad (16)$$

where $\gamma \approx (\pi \Gamma^2 / 2 \omega_1 d) (\hbar / m \omega_2)^{1/2}$, Γ is level broadening, and d is the range of the electron-impurity interaction. The components of the conductivity tensor of matrix (3) can be obtained when we return back to the xyz frame,

$$\sigma_{xx} = \sigma'_{XX} \cos^2 \alpha + \sigma'_{ZZ} \sin^2 \alpha,$$

$$\sigma_{xy} = \sigma'_{Xy} \cos \alpha + \sigma'_{yz} \sin \alpha,$$

$$\sigma_{xz} = (\sigma'_{Xy} - \sigma'_{yz}) \cos \alpha \sin \alpha,$$

$$\sigma_{yz} = \sigma'_{yz} \cos \alpha - \sigma'_{Xy} \sin \alpha,$$

$$\sigma_{zz} = \sigma'_{ZZ} \cos^2 \alpha + \sigma'_{XX} \sin^2 \alpha,$$

$$\sigma_{yy} = \sigma'_{yy}.$$

Finally, the Hall longitudinal and transverse resistivity components are obtained by inverting the conductivity tensor. For Hall resistivity we have

$$\rho_{xy} = - \frac{\sigma_{xy} \sigma_{zz} + \sigma_{xz} \sigma_{yz}}{\sigma_{xx} \sigma_{yy} \sigma_{zz} + \sigma_{xx} \sigma_{yz}^2 - \sigma_{yy} \sigma_{xz}^2 + \sigma_{zz} \sigma_{xy}^2 + 2 \sigma_{xy} \sigma_{xz} \sigma_{yz}}. \quad (17)$$

In Fig. 6 we plot the dependence of the Hall resistivity on the magnetic field for $\hbar \Omega = 2.85$ meV, $\Theta \approx 89$ deg, $\Gamma = 0.8$ meV and $n_s = 3.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Indeed we find that the Hall resistivity depends on the electron density and tilt angle, and is not sensitive to the confining potential. It is worth noting that the parameter Γ is deduced from the zero field conductivity

FIG. 9. The Hall resistance calculated from Eq. (12) for different parameters $\Delta\Gamma_s$ (meV): 0.0, 0.01, 0.03, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3. Circles—experimental curve for a 4000 Å-wide parabolic well at $\Theta \approx 89$ deg and $T = 1.5$ K.

measurements. The range of the electron-impurity interaction is not well known in our structure, we take it to be $0.1\text{--}0.2 \mu\text{m}$. Now we consider the electron motion in the z direction. As we already mentioned above, this motion is strongly suppressed, because it requires a spin flip process due to variation of the g factor along the z axis. We cannot calculate the spin flip process in our structure. Moreover, the electronic motion in the x direction is strongly coupled with that in the z direction. However, in the new coordinate system XyZ , the electronic motion in the X and Z directions is decoupled. In principle, in this case we may separate the scattering time for both directions, although spin flip processes indeed are included into the scattering time for both conductivity components σ'_{XX} and σ'_{ZZ} . We may introduce phenomenological parameter $\Delta\Gamma_s$, which is responsible for the spin-valve effect in the z direction. We denoted $\Delta\Gamma_s = \Gamma_{ZZ} - \Gamma_{XX}$, where Γ_{ZZ} , Γ_{XX} are levels broadening for X and Z directions, added it to the γ in Eq. (8), and calculated the Hall conductivities for various value of $\Delta\Gamma_s$. Figure 9 plots ρ_{xy} as a function of the magnetic field. As we expected, additional asymmetric (for X and Z directions) scattering leads to the increase in the slope of the Hall resistance. It is worth noting that at $B < 4$ T the Hall resistance is not linear and is lower than Hall resistance for the $\Delta\Gamma_s = 0$ case. This can be explained by simplifications that are done in our model. Spin flip scattering is strongly depends on the magnetic field, it turns on only after hybrid level depopulation, when a local g factor becomes z dependent. Since we are interested here in the high field slope of the Hall resistance, the curves plotted in Fig. 6 are calculated for B -independent $\Delta\Gamma_s$. We may see that the magnitude of $\Delta\Gamma_s$ decreases with a temperature increase, since at high temperature the fast spin-flip processes destroys the spin valve effect and electrons move in the z direction with the same probability as in the x and y direc-

tions. In spite of the indirect character of obtained information, the behavior of the parameter $\Delta\Gamma_S$ may be interesting, because the amount of interest to the spin relaxation in a low-dimensional system is only poorly supported by the experiments, especially from transport measurements. Indeed a further theoretical investigation of the transport in a parabolic well with a locally varied g factor is required for a detailed comparison with experiments.

V. CONCLUSION

We demonstrated that the variation of the g factor along the well width is responsible for the Hall slope change in a wide parabolic well in the presence of the strong in-plane magnetic field. We attribute such a large Hall slope to the spin valve effect in the z direction, which also suppresses the motion in the y direction. It may be justified by the several experimental observations. First, the Hall effect deviates from the ordinary slope at $B > 4$ T, when the magnetic length becomes smaller than the well width, and the local g factor turns to be the z dependent. In a lower field the g factor should be calculated by averaging the local g factor along the z axis: $\langle g \rangle = (1/W) \int_{-W/2}^{W/2} g(z) |\Psi(z)|^2 dz$, where Ψ is the electron wave function; therefore the motion in the z direction is

not spin dependent. Second, the Hall slope change is observed in a quasiparallel magnetic field, since the strong in-plane field makes the local g factor variable along the z axis. The change in the Hall slope also occurs in the presence of multiple carrier types as the subbands are depopulated, however, this change has an opposite sign and cannot explain our observation in the quasiparallel magnetic field. Finally, the Hall slope change is observed only in the parabolic well, which is almost completely filled by electrons. In these samples the effective g factor changes the sign across the well, which can lead to the spin-valve effect. In a partially filled parabolic well the sign change of the g factor along the z direction does not occur, and Hall resistance is not affected by spin-dependent transport. In order to quantitatively interpret the data we use a model that contains all the conductivity components of a parabolic well in a tilted field. A spin-valve effects lead to the anisotropy of these components, which can be a controlled by a phenomenological parameter.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors thank O. G. Balev for useful discussions. Support of this work by FAPESP, CNPq (Brazilian agencies) is acknowledged.

*Deceased.

¹M. Sundaram, A. C. Gossard, J. H. English, and R. M. Westervelt, *Superlattices Microstruct.* **4**, 683 (1988).

²M. Shayegan, T. Sajoto, M. Santos, and C. Silvestre, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 791 (1988).

³C. Weisbuch and C. Hermann, *Phys. Rev. B* **15**, 816 (1977).

⁴G. Salis, Y. Kato, K. Ensslin, D. C. Driscoll, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Nature (London)* **414**, 619 (2001).

⁵G. M. Gusev, A. A. Quivy, T. E. Lamas, J. R. Leite, O. Estibals, and J. C. Portal, *Phys. Rev. B* **67**, 155313 (2003).

⁶G. M. Gusev, A. A. Quivy, T. E. Lamas, J. R. Leite, A. K. Bakarov, A. I. Toropov, O. Estibals, and J. C. Portal, *Phys. Rev. B* **65**, 205316 (2002).

⁷*Landau Level Spectroscopy*, edited by G. Lanwehr and E. I. Rashba (Elsevier Science, Amsterdam, 1991).

⁸E. Zaremba, *Phys. Rev. B* **45**, 14 143 (1992).

⁹C. M. Hurd, *The Hall Effect in Metals and Alloys* (Plenum, New York, 1972).

¹⁰J. Smith, *Physica (Amsterdam)* **21**, 877 (1955).

¹¹L. Berger, *Phys. Rev. B* **2**, 4559 (1970).

¹²J. N. Chazalviel and I. Solomon, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 1676 (1972).

¹³R. Merlin, *Solid State Commun.* **64**, 99 (1987).

¹⁴C. Zhang and Y. Takahashi, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 835 (1997).

Room temperature ferromagnetism in cubic GaN epilayers implanted with Mn⁺ ions

V. A. Chitta,^{a)} J. A. H. Coaquira, J. R. L. Fernandez, C. A. Duarte, and J. R. Leite
Instituto de Física da Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, 05315-970 São Paulo, SP, Brazil

D. Schikora, D. J. As, and K. Lischka
Universität Paderborn, FB6 Physic, D-33095 Paderborn, Germany

E. Abramof
*Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE-LAS), Caixa Postal 515,
 12901-970 São José dos Campos, SP, Brazil*

(Received 8 June 2004; accepted 6 September 2004)

Mn ions were implanted in *p*-type cubic GaN at doses from 0.6 to $2.4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ at 200 keV energy. A 200-nm -thick epitaxial layer, grown by molecular beam epitaxy on GaAs(001) substrate, is used for the Mn implantation. The Mn implanted samples were subjected to an annealing at 950°C for $1\text{--}5 \text{ min}$. The structural quality of the samples was investigated by high resolution x-ray diffraction and Raman spectroscopy. The annealing procedure leads to a significant increasing of the crystalline quality of the samples. Hysteresis loops were observed for all cubic GaMnN annealed samples and ferromagnetism was detected up to room temperature. © 2004 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.1812590]

Group-III nitrides semiconductors have attracted much interest due to their usefulness in short-wavelength optoelectronics and high voltage, high-temperature, and high-frequency electronic devices.^{1–4} Especially, cubic (zinc blende) GaN has received much attention since the successful fabrication of light-emitting diodes based on structures built up using this material.^{5–10} On the other hand, since the discovery of carrier induced ferromagnetism in InMnAs and GaMnAs, the interest in diluted magnetic semiconductors (DMS) has renewed. However, due to the low Curie temperature, T_C , presented by these compounds, new DMS materials should be developed to be used in practical applications. Theoretically, Dietl *et al.*¹¹ using the Zener model, in which the ferromagnetic interaction between the localized moments is considered to be mediated by holes, calculated the Curie temperature for different III–V and II–VI semiconductors containing 5% of Mn and a hole concentration of $3.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. In particular, they predicted a T_C above room temperature for GaMnN. Several experimental results on the magnetic properties of hexagonal (wurtzite) GaN-based DMS can be found in the literature.^{12–19} Nevertheless, the results are not conclusive, since a paramagnetic as well as a ferromagnetic behavior has been observed, with a great variation of T_C . The very few experimental studies of cubic GaN-based DMS are restricted so far to the investigations of structural and electrical properties of GaMnN layers.^{20,21} Recently, *p*-type conductivity in cubic GaMnN layers grown by molecular beam epitaxy on GaAs(001) substrates was observed.²¹ Also recently, in a theoretical work, ferromagnetism in the metallic phase of cubic GaMnN layers was studied by Monte Carlo simulations and Curie transition temperatures high above room temperature were predicted.²²

In this letter we report on the investigation of the magnetic properties of cubic GaN implanted with Mn ions. In contrast with the stable hexagonal phase, the cubic samples

are free of spontaneous polarization and strain-induced piezoelectric field, which can provide much longer spin relaxation times. Moreover, for cubic GaN we expect a Curie temperature 6% higher than for the wurtzite structure.¹¹ The cubic GaN sample was grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy, using a Riber-32 system, equipped with elemental sources of Ga and As, and an Oxford Applied Research CARS 25 rf-activated plasma source. The 200-nm -thick layer was grown on a GaAs(001) substrate at a temperature of 720°C . Details of the growth procedure were reported in Ref. 23. Four pieces of the same sample were implanted with four different doses of Mn ions as shown in Table I. The energy and temperature of implantation were kept constant at 200 keV and 350°C , respectively. The implanted layer is estimated to be centered at approximately 110 nm from the surface and the implanted doses to correspond roughly to Mn concentrations varying from 1% to 3%. After implantation the samples were annealed up to 5 min at 950°C under flowing nitrogen.

The structural quality of the samples was inspected by high resolution x-ray diffraction and Raman spectroscopy. The x-ray spectra show that after implantation and annealing the samples conserved their cubic structure with no appearance of hexagonal inclusions. This was also confirmed by the Raman measurements as can be seen in Fig. 1 where the spectra, obtained at 10 K , for the samples before implantation (460—thin solid line), 460B just after implantation (dot-

TABLE I. Implantation doses (d), annealing time at 950°C (t), and estimated Mn concentration (x).

Sample	$d \text{ (cm}^{-2}\text{)}$	$t \text{ (min)}$	$x \text{ (%)}$
460	...	...	0
460A	6.0×10^{15}	1	0.7
460B	1.2×10^{16}	1	1.4
460C	1.8×10^{16}	1	2.1
460D	2.4×10^{16}	5	2.8

^{a)}Electronic mail: vchitta@macbeth.if.usp.br

FIG. 1. Raman spectra of sample 460 (thin solid line) and 460B just after implantation (dotted line) and after annealing of 1 min at 950 °C (thick solid line). The vertical-dotted lines denote the transverse-optical (TO) and longitudinal-optical (LO) cubic GaN phonon frequencies.

ted line), and 460B after 1 min of annealing (thick solid line) are depicted. The Raman spectrum of the sample before implantation shows the characteristic transverse-optical (TO) and longitudinal-optical (LO) phonon frequencies of cubic GaN at 555 and 741 cm⁻¹, respectively.²⁴ As can be observed, just after implantation, the sample shows a curve characteristic of an almost amorphous material, with all the characteristic peaks being smeared out, including the peaks related to GaAs, indicating that the substrate has also been disturbed by the implantation. After 1 min of annealing the crystalline quality has been partially recovered and, increasing the annealing time, this improves. In all the spectra no traces of hexagonal phase can be observed.

The electrical characteristics of the samples were measured at room temperature. The nonimplanted sample (460 in Table I) displays an intrinsic hole concentration of $3.7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. A slight improvement in the hole concentration is observed after implantation and annealing. This could be attributed to the introduction of the Mn ions, but, as it has been reported,^{25,26} the energy level induced by Mn in GaN is located deep in the gap, and thus would be an ineffective acceptor dopant. On the other hand, since stoichiometry effects, crystal defects, unintentional impurities, and conduction through the substrate may control the final conductivity, the annealing rather than the introduction of Mn could be responsible for this improvement.

Magnetization measurements of the Mn implanted cubic GaN, performed with a superconducting quantum interference device, showed them to be ferromagnetic below room temperature. In Fig. 2, we show the magnetic moment as a function magnetic field, measured at 10 K, for the annealed samples 460B, 460C, and 460D. We observe hysteresis loop for all of our implanted samples and, as the implantation

FIG. 2. Magnetic moment as a function of magnetic field at 10 K for samples 460B, 460C, and 460D.

FIG. 3. Magnetization as a function of magnetic field at 10 and 300 K for sample 460D. The inset shows the low field region magnetization, measured at 10 K, where hysteresis can be observed.

doses increase, the magnetic moment at saturation increases too. The reference sample (nonimplanted) shows only the characteristic diamagnetic response, i.e., no hysteresis loop is observed for this sample.

The magnetization versus magnetic field curves for the highly Mn-implanted GaN epilayer, measured at 10 and 300 K, are presented in Fig. 3. At 300 K the magnetization increases steeply at low fields, and saturates at approximately 2.5 kOe. The increase in magnetization at 10 K is less accentuated, possibly due to a paramagnetic contribution. The curves show hysteresis for both temperatures, with coercive fields of 150 and 100 Oe for 10 and 300 K, respectively. This hysteresis at low field, for the magnetization measured at 10 K, is shown in the inset of Fig. 3. A remanent magnetization of about 0.1–0.2 emu/g can also be observed. From the saturation value we can obtain the number of active Mn atoms, $N_{\text{Mn}} = M_S / g \mu_B S$, where M_S is the magnetization at saturation, $g=2$ is the g factor of Mn, μ_B is the Bohr magneton, and $S=5/2$ if we consider Mn²⁺. Taking $M_S \approx 0.8 \text{ emu/g}$ we obtain $N_{\text{Mn}} = 8.9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, which correspond to an effective Mn concentration of only 0.2%.

The temperature-dependent magnetization for the sample implanted with $2.4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ Mn ions is presented in Fig. 4. The shape of the curves is very similar to those obtained from implanted hexagonal GaN,¹⁶ and may indicate the presence of a paramagnetic phase at low temperatures, as can also be inferred from the hysteresis loop at 10 K. We can attribute the ferromagnetic behavior observed in our samples to the presence of Mn in the GaN layer. Even with the GaAs substrate being disturbed by the Mn implantation, as shown by the Raman spectra, we can expect a negligible contribution from the substrate to the magnetic characteristic of our samples. With the doses and energy used for the implantation, we can expect a very small concentration of Mn at the substrate, near the interface with the GaN layer. As shown by

FIG. 4. Field-cooled (FC) and zero field-cooled (ZFC) magnetization as a function of temperature for sample 460D.

Song *et al.*,²⁷ the magnetization measured in GaAs implanted with $7.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ Mn ions, which is 30 times larger than the highest dose we have used, is two orders of magnitude smaller than the magnetization we measured in our samples.

In conclusion, we show that cubic GaN films implanted with Mn ions clearly exhibit ferromagnetism at room temperature. At this point we are unable to clearly establish the origin of ferromagnetism in our samples. It is certainly reasonable to say that the origin of ferromagnetism in diluted magnetic semiconductors based on GaN is still not totally understood. However, ferromagnetism has been observed in samples with hexagonal structure that have very low hole concentrations, in insulating material, even in *n*-type material. The expected fact that GaMnN with cubic structure also exhibits interesting ferromagnetic properties is confirmed here.

This work was supported by *Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo* (FAPESP), *Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico* (CNPq) and *Deutsche Forschungsgemeinschaft* (DFG). The authors are thankful to Professor I. Baumvol and Professor F. Zawislak for the ion implantations carried out at the Physics Institut, UFRGS.

¹S. Strite and H. Marcoç, J. Vac. Sci. Technol. B **10**, 1237 (1992).

²S. Nakamura and G. Fasol, *The Blue Laser Diode* (Springer, Berlin, 1997).

³J. Orton and C. Foxon, Rep. Prog. Phys. **61**, 1 (1998).

⁴P. Kung and M. Razeghi, Opto-Electron. Rev. **8**, 201 (2000).

⁵S. F. Chichibu, A. C. Abare, M. P. Mack, M. S. Minsky, T. Deguchi, D. Cohen, P. Kozodoy, S. B. Fleischer, S. Keller, J. S. Speck, J. E. Bowers, E. Hu, U. K. Mishra, L. A. Coldre, S. P. Den Baars, K. Wada, T. Sota, and S. Nakamura, Mater. Sci. Eng., B **59**, 298 (1999).

⁶L. M. R. Scolfaro, Phys. Status Solidi A **190**, 15 (2002).

⁷H. Yang, L. X. Zheng, J. B. Li, X. J. Wang, D. P. Xu, Y. T. Wang, X. W. Hu, and P. D. Han, Appl. Phys. Lett. **74**, 2498 (1999).

⁸D. J. As, A. Richter, J. Busch, M. Lübbes, J. Minikes, and K. Lischka, Appl. Phys. Lett. **76**, 13 (2000).

⁹H. Gomez-Cuatzin, J. Tardy, P. Rojo-Romeo, A. Philippe, C. Bru-Chevalier, A. Souifi, G. Guillot, E. Martinez-Guerrero, G. Feuillet, B. Daudin, P. Aboughé-Nzé, and Y. Monteil, Phys. Status Solidi A **176**, 131

(1999).

¹⁰Y. Taniyasu, K. Suzuki, D. H. Lim, A. W. Jia, M. Shimotomai, Y. Kato, M. Kobayashi, A. Yoshikawa, and K. Takahashi, Phys. Status Solidi A **180**, 241 (2000).

¹¹T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, and D. Ferrand, Science **287**, 1019 (2000).

¹²M. Zajac, R. Doradzinski, J. Gosk, J. Szczytko, M. Lefeld-Sosnowska, M. Kaminska, A. Towardowski, M. Palczewska, E. Grzanka, and W. Gebicki, Appl. Phys. Lett. **78**, 1276 (2001).

¹³M. Zajac, J. Gosk, M. Kaminska, A. Towardowski, T. Szyszko, and S. Podsiadlo, Appl. Phys. Lett. **79**, 2432 (2001).

¹⁴M. L. Reed, M. K. Ritums, H. H. Stadelmaier, M. J. Reed, C. A. Parker, S. M. Bedair, and N. A. El-Masry, Mater. Lett. **51**, 500 (2001).

¹⁵M. L. Reed, N. A. El-Masry, H. H. Stadelmaier, M. E. Ritums, N. J. Reed, C. A. Parker, J. C. Roberts, and S. M. Bedair, Appl. Phys. Lett. **79**, 3473 (2001).

¹⁶N. A. Theodoropoulou, A. F. Hebard, M. E. Overberg, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, S. N. G. Chu, and R. G. Wilson, Appl. Phys. Lett. **78**, 3475 (2001).

¹⁷S. Sonoda, S. Shimizu, T. Sasaki, Y. Yamamoto, and H. Hori, J. Cryst. Growth **237**, 1358 (2002).

¹⁸G. T. Thaler, M. E. Overberg, B. Gila, R. Frazier, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, J. S. Lee, S. Y. Lee, Y. D. Park, Z. G. Khim, J. Kim, and F. Ren, Appl. Phys. Lett. **80**, 3964 (2002).

¹⁹S. J. Pearton, C. R. Abernathy, M. E. Overberg, G. T. Thaler, D. P. Norton, N. Theodoropoulou, A. F. Hebard, Y. D. Park, F. Ren, J. Kim, and L. A. Boatner, J. Appl. Phys. **93**, 1 (2003).

²⁰Y. Cui, V. K. Lazarov, M. M. Goetz, H. Liu, D. P. Robertson, M. Gajdardziska-Josifovska, and L. Li, Appl. Phys. Lett. **82**, 4666 (2003).

²¹S. V. Novikov, K. W. Edmonds, A. D. Giddings, K. Y. Wang, C. R. Staddon, R. P. Campion, B. L. Gallagher, and C. T. Foxon, Semicond. Sci. Technol. **19**, L13 (2004).

²²M. A. Boselli, I. C. da Cunha Lima, J. R. Leite, A. Troper, and A. Ghazali, Appl. Phys. Lett. **84**, 1138 (2004).

²³D. Schikora, M. Hankeln, D. J. As, K. Lischka, T. Litz, A. Waag, T. Buhrow, and F. Henneberger, Phys. Rev. B **54**, R8381 (1996).

²⁴A. Tabata, R. Enderlein, J. R. Leite, S. W. da Silva, J. C. Galzerani, D. Schikora, M. Kloidt, and K. Lischka, J. Appl. Phys. **79**, 4137 (1996).

²⁵R. Y. Korotkov, J. M. Gregie, and B. W. Wessels, Appl. Phys. Lett. **80**, 1731 (2002).

²⁶T. Graf, M. Gjukic, M. S. Brandt, M. Stutzmann, and O. Ambacher, Appl. Phys. Lett. **81**, 5159 (2002).

²⁷S. -L. Song, N. -F. Chen, J. -P. Zhou, Z. -G. Yin, Y. -L. Li, S. -Y. Yang, and Z. -K. Liu, J. Cryst. Growth **264**, 31 (2004).