Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

MARCO ANTONIO DE OLIVEIRA HACHIYA

Efeito Hall de spin em poços quânticos com
acoplamento spin-órbita inter-subbanda

São Carlos

2009

MARCO ANTONIO DE OLIVEIRA HACHIYA

Efeito Hall de spin em poços quânticos com acoplamento spin-órbita inter-subbanda

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Básica.

Orientador: Prof. Dr. José Carlos Egues.

São Carlos

2009

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação IFSC/USP

Hachiya, Marco Antonio de Oliveira.

Efeito Hall de spin em poços quânticos com acoplamento spin-órbita inter-subbanda./ Marco Antonio de Oliveira Hachiya; orientador José Carlos Egues.-- São Carlos, 2009.

93 p.

Dissertação (Mestrado em Ciências - Área de concentração: Física Básica) – Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo.

1. Spintrônica. 2. Efeito Hall de spin. 3. Interação spin-órbita. I. Título.

**IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**
Instituto de Física de São Carlos

Caixa Postal 369
13560-970 São Carlos, SP
Av. Trabalhador São-carlense, 400
13566-590 - São Carlos, SP

Fone/Fax: (16) 3373. 9777
www.ifsc.usp.br
svposgrad@ifsc.usp.br

FOLHA DE APROVAÇÃO

Marco Antonio de Oliveira Hachiya

Dissertação apresentada ao Instituto de Física
de São Carlos da Universidade de São Paulo
para obtenção do título de Mestre em Ciências.
Área de Concentração: Física Básica.

Aprovado em: 19/02/2009

Comissão Julgadora

Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes

Instituição: IFSC/USP

Assinatura

Prof. Dr. Erasmo de Assumpção de Andrada e Silva

Instituição: INPE

Assinatura

Prof. Dr. Jose Candido Xavier

Instituição: UFU

Assinatura

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho aos meus pais, Marineti e Jesus, e aos meus irmãos, Jamile e João Paulo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à meus pais pelo apoio dado nos momentos de incerteza e os questionamentos levantados quando minhas decisões pareciam certas. Ao meu pai pela ajuda nas decisões e por ensinar com exemplos como se transformar no profissional que pretendo ser. À minha mãe pelo apoio, confiança, risadas ao telefone e disposição para me ajudar sem questionamentos. Sua boa vontade em ajudar a todos é um exemplo para os que convivem com ela.

A minha irmã Jamile pelas horas de brigas, conhecimentos e músicas trocadas (“Like a rolling stone?”). Ao meu irmão João Paulo pelas horas de brigas, dicas sobre video-game e conversas irônicas (“I don’t need to fight, to prove I’m right”). Aos meus avós, Floripes, Luisa (in Memorian), Etsuo (in Memorian) e João pela preocupação com o neto longe de casa.

À Léa pelo apoio, amizade e conselhos na hora certa (“Those sweet words”).

Aos meus amigos Henrique, Alexandre e Rafael pela troca de idéias, muitas risadas e dinheiro emprestado (“The best things in life are free”).

Aos meus amigos de curso (Charles, Kazão, Filipe, Lorenzen, Bruno, Jader) pelas dúvidas resolvidas e pela amizade. Aos meus amigos de república Ricardo e Bruno pelas risadas e pelas contas de luz e telefone esquecidas. Agradeço aos meus amigos de sala Mariana, Vivian, Fabiano pela ajuda com Física, assuntos burocráticos e horas de estudo sem ventilador.

Ao meu Padrinho e Madrinha pelo estimulante ambiente de aprendizado e questionamentos e pela hospedagem quando precisei.

À secretária do grupo Cris pelo trabalho em nos auxiliar, conversas e seriados da TV americana. Agradeço aos funcionários da biblioteca e do IFSC em geral.

Aos professores do IFSC pelas horas de ensino e tentativa de nos entusiasmar com a Física que se revelava na nossa frente e não diante de exames e equações decoradas.

Ao apoio financeiro da Capes e dos pais.

Ao orientador J. C. Egues pela dedicação ao trabalho e aos seus alunos e pela seriedade com que encara a Física. Ao professor Esmerindo pela ajuda com as simulações numéricas

e pelo ensino do caminho a ser tomado, apresentando as dificuldades e compartilhando-as. Aos membros do grupo Filipe e Gérson por resolverem minhas dúvidas. Aos outros membros do grupo, Thiago e Antônio, pelos questionamentos levantados. Finalmente, à Poliana, Esmerindo, Filipe, Egues e Gérson pelas revisões do manuscrito.

Devido à ajuda de todas as pessoas citadas posso ter um diploma e continuar meus estudos. Este trabalho leva meu nome, mas ele é de fato feito por todos que convivem comigo.

Who are we? We find that we live on an insignificant planet of a humdrum star lost in a galaxy tucked away in some forgotten corner of a universe in which there are far more galaxies than people.

Carl Sagan

RESUMO

HACHIYA, M. O. **Efeito Hall de spin em poços quânticos com acoplamento spin-órbita inter-subbanda** 2009. (93) p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

A partir da teoria de resposta linear (formalismo de Kubo) calculamos a condutividade de spin σ_{xy}^z para um gás bidimensional de elétrons formado num poço quântico com duas subbandas devido a atuação de um novo tipo de interação spin-órbita [Bernardes et al. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 076603 (2007) & Calsaverini et al. *Phys. Rev. B* **78**, 155313 (2008)]. Este novo termo é não-nulo mesmo em estruturas simétricas e surge devido ao acoplamento entre os estados confinados no poço de paridades diferentes. Encontramos um valor para σ_{xy}^z não-nulo e não-universal (dependente da intensidade do acoplamento η) quando somente uma das subbandas está ocupada, ao contrário de Rashba. Para encontrarmos valores realistas para σ_{xy}^z , determinamos η via cálculo autoconsistente. Esse cálculo é executado para diferentes valores de densidade eletrônica em poços simples e duplos. Obtivemos que σ_{xy}^z possui um comportamento não-monótono e sofre inversão de sinal como função da energia de Fermi (densidade de elétrons) conforme ela varia entre as duas subbandas. Contudo nossos resultados indicam que a condutividade Hall de spin é muito pequena ($\ll \frac{e}{8\pi}$) nesses sistemas (poços simples e duplos) e possivelmente não mensurável.

Palavras-chave: Spintrônica. Efeito Hall de spin. Interação spin-órbita.

ABSTRACT

HACHIYA, M. O. **Spin Hall effect in quantum wells with intersubband spin-orbit coupling** 2009. (93) p. Thesis (Master) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

Using the Kubo linear response theory, we investigate spin Hall conductivity σ_{xy}^z in a two-dimensional electron gas in quantum wells with two subbands, when intersubband-induced spin-orbit coupling is operative [Bernardes et al. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 076603 (2007) & Calsaverini et al. *Phys. Rev. B* **78**, 155313 (2008)]. This new spin-orbit term is non-zero even in symmetric structures and it arises from the distinct parity of the confined states. We find non-zero and non-universal σ_{xy}^z (dependent on spin-orbit coupling strength η) when only one of the subbands is occupied. This is in contrast to the Rashba spin-orbit interaction for which σ_{xy}^z is identically zero. To obtain realistic values for σ_{xy}^z , we develop a self-consistent scheme to calculate η . We performed this calculation for different values of the electronic density in single and double wells. We find that σ_{xy}^z shows a non-monotonic behavior and a sign change as the Fermi energy (carrier density) varies between the two subband edges. However, our results indicate that σ_{xy}^z is extremely small (“ $\ll \frac{e}{8\pi}$ ”) and possibly not measurable.

Keywords: Spintronics. Spin Hall Effect. Spin-orbit interaction.

Lista de Figuras

- Figura 1.1. Dispositivo spintrônico Datta-Das: A direção do grau de liberdade magnético do elétron (spin) é controlada por uma diferença de potencial V_g aplicada por um eletrodo externo. A intensidade de V_g pode ou não alinhar o spin do elétron com a direção de magnetização no coletor, permitindo ou não a sua entrada. 28
- Figura 1.2. Representação pictórica do efeito Hall de Spin. As polarizações dos spins dos elétrons próximos da borda do material estão fora do plano e tem direções opostas. 30
- Figura 1.3. Valores médios para a direção de spin num corte no plano de k_x e k_y das auto-energias para o Hamiltoniano de Rashba, μ denota o ramo desse espectro. 35
- Figura 1.4. Ramo $\mu = -$. O spin (vermelho) precessiona em torno do campo magnético efetivo, para o valor de k_x positivo ele sai do plano na direção negativa do eixo z (torque τ negativo) e para k_x negativo ele sai na direção positiva (torque τ positivo). 36
- Figura 1.5. Ramo $\mu = +$. O spin (vermelho) precessiona em torno do campo magnético efetivo, para o valor de k_x positivo ele sai do plano na direção positiva do eixo z (torque τ positivo) e para k_x negativo ele sai na direção negativa (torque τ negativo). 36

Figura 1.6. Alinhamento dos spins no espectro de Rashba devido a aplicação de um campo elétrico $\vec{E} = E\hat{y}$. Anteriormente a aplicação de $\vec{E}$, a direção do valor médio do spin (seta roxa) está alinhado com o campo magnético efetivo $B_{ef}(\vec{k})$. O campo elétrico $\vec{E}$ aplicado faz o disco de Fermi se mover por uma distância δk_y alterando o $B_{ef}(\vec{k})$. O spin tenta se alinhar saindo do plano na direção positiva de k_z (seta vermelha contínua) ou na direção negativa de k_z (seta vermelha pontilhada). Adaptado da referência (1). 37

Figura 2.1. Perfis estruturais criados pela offsets da banda de condução (roxo), banda de valência (azul) e banda de *split-off* (verde) da heteroestrutura. 44

Figura 2.2. Bloco da matriz formada pela projeção do Hamiltoniano (2.24) na base de spin e de auto-funções do oscilador harmônico. Usamos $(b_1, b_2) = (e, o)$ para $\lambda = +$ e $(b_1, b_2) = (o, e)$ para $\lambda = -$ ordenando a base para cada subespaço. 50

Figura 3.1. Diagrama esquemático descrevendo as transições inter(azul) e intra-ramos(vermelho). n_μ denota o mais alto nível de Landau preenchido nos ramos $\mu = +$ ou $\mu = -$. A figura da esquerda representa o caso $\epsilon_F > \epsilon_o$, e da direita o caso $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$ 66

Figura 3.2. Condutividade Hall de spin total(roxo) para os termos $\sigma_{xy}^{z(1)}$ (esquerda) e $\sigma_{xy}^{z(2)}$ (direita), resultado das contribuições inter-ramos(azul) e intra-ramos(vermelho). 75

Figura 3.3. Condutividade Hall de spin(roxo) resultado da soma das contribuições inter-ramos(azul) e intra-ramos(vermelho). A condutividade σ_{xy}^z se anula para $\epsilon_F > \epsilon_o$ mas é não-nula em $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$. Note que a contribuição intra-ramos é responsável pela descontinuidade em $\epsilon_F = \epsilon_e$ e $\epsilon_F = \epsilon_o$ 75

Figura 4.1. Representação esquemática para o cálculo autoconsistente. O critério de parada para esse cálculo é a convergência das energia das iterações sucessivas. 78

Figura 4.2. Condutividade Hall de spin total σ_{xy}^z (preto) devido à contribuições inter-ramos (vermelho) e intra-ramos (azul) num poço simples com largura de 20 nm. 83

Figura 4.3. Figura semelhante a 4.2 mas num poço simples com largura de 25 nm. . .	84
Figura 4.4. Figura semelhante a 4.2 mas num poço simples com largura de 30 nm. . .	84
Figura 4.5. Condutividade Hall de spin total σ_{xy}^z (preto) devido à contribuições inter-ramos (vermelho) e intra-ramos (azul) em poços com largura de 100 nm e barreira central com largura de 5 nm.	85

Lista de Tabelas

Tabela 4.1	- Parâmetros de estrutura de bandas de InSb e AlSb	81
Tabela 4.2	- Parâmetros de abaulamento e VBO para as ligas de $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$. . .	81

Sumário

1	Introdução	25
1.1	Heteroestruturas semicondutoras e Spintrônica	25
1.2	Interação spin-órbita	26
1.2.1	Transistor Datta-Das	27
1.3	Correntes de spin induzidas por campo elétrico	29
1.3.1	Visão geral para o efeito Hall de spin	31
1.3.2	Detecção experimental	32
1.3.3	Efeito Hall de spin intrínseco	33
1.3.4	Argumento simples para $\sigma_{xy}^z = 0$ no modelo de Rashba	38
1.4	Motivações para o cálculo de σ_{xy}^z	39
2	Hamiltoniano spin-órbita inter-subbanda	40
2.1	Formulação do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$	40
2.2	Modelo de Kane 8×8 - caso bulk	42
2.3	Modelo de Kane para heteroestruturas	43
2.4	Hamiltoniano efetivo com interação spin-órbita inter-subbanda	45
2.5	Aplicação do campo magnético ao Hamiltoniano spin-órbita inter-subbanda.	
	47	
3	Resposta Linear aplicada à correntes de spin: condutividade Hall de spin	51
3.1	Introdução	51
3.2	Teoria da Resposta Linear	53

3.2.1	Função resposta na aproximação de material homogêneo: $\chi(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$	56
3.2.2	Função resposta para elétrons independentes	58
3.3	Cálculo da condutividade Hall de spin na presença do Hamiltoniano spin-órbita inter-subbanda	61
3.3.1	Simplificações na expressão (3.33) para a condutividade Hall de spin	63
3.3.2	Procedimento para o cálculo de σ_{xy}^z	65
3.3.3	Contribuições para a condutividade devido a $\sigma_{xy}^{z(1)}$	67
3.3.4	Contribuições para a condutividade devido a $\sigma_{xy}^{z(2)}$	71
3.3.5	Resultado final para a condutividade Hall de spin σ_{xy}^z	73
4	Resultados	77
4.1	Cálculo autoconsistente	77
4.2	Nível de Fermi para o Hamiltoniano efetivo spin órbita inter-subbanda	79
4.3	Escolha dos materiais	80
4.4	Análise dos resultados para a condutividade Hall de spin	82
4.4.1	Poços quânticos simples: $\text{Al}_{0,3}\text{In}_{0,7}\text{Sb}/\text{InSb}$	83
4.4.2	Poços quânticos duplos: $\text{Al}_{0,4}\text{In}_{0,6}\text{Sb}/\text{InSb}$ com barreira $\text{Al}_{0,12}\text{In}_{0,88}\text{Sb}$	85
5	Conclusões	87
	Referências	89
	Apêndice A	89
	Apêndice B	93

Capítulo 1

Introdução

1.1 Heteroestruturas semicondutoras e Spintrônica

Fenômenos dependentes de spin em Física da Matéria Condensada tem atraído atenção na última década devido a variedade de novas propostas para dispositivos envolvendo o spin eletrônico. A área multidisciplinar que estuda esses fenômenos é denominada Spintrônica, um neologismo para a expressão em inglês *Spin transport electronics*. O reconhecimento de sua aplicabilidade e importância foi formalizado pela Fundação Nobel com a premiação de Grunberg e Fert em 2007 pela descoberta da Magneto-resistência gigante. De forma geral, a Spintrônica trata da criação, controle, manipulação e detecção de correntes de elétrons com spin polarizado (correntes de spin) e como esse conhecimento, além de motivar um entendimento maior da Física do Estado Sólido em metais e semicondutores, pode resultar em novos dispositivos spintrônicos. Acredita-se que esses novos dispositivos podem trazer melhorias em relação aos usados na eletrônica convencional como a redução do consumo de energia, maior capacidade de armazenamento de memória e velocidade de leitura dos dados, miniaturização, produção de memórias não-voláteis, etc (2). Ainda que poucas propostas resultem em aplicações, investigações da área propiciam um melhor entendimento dos materiais e interações fundamentais nos mesmos tais como interação elétron-elétron, elétron-fônon, etc.

A pesquisa em Spintrônica envolve diversos tipos de materiais como metais e semicondutores. Nestes, pode-se criar confinamentos para os elétrons em uma, duas e em três dimensões usando, por exemplo, os offsets das bandas de energia de cada material em uma heteroestrutura. Assim temos, respectivamente, o gás de elétrons bidimensional (2DEG), os fios quânticos e os pontos quânticos. As técnicas experimentais como epitaxia de feixe molecular (MBE) e deposição química de vapores organometálicos (MOCVD) avançam crescendo essas estruturas cada vez mais puras e de maneira mais precisa.

Para obter-se um 2DEG, cria-se uma estrutura de bandas dependente da posição na direção de crescimento da heteroestrutura. Os offsets entre a banda de condução de cada material criam um poço de potencial (quântico) confinando os elétrons em níveis de energias discretos e os deixando livres no plano perpendicular a essa direção. Veremos que esses elétrons no 2DEG podem ter seu grau de liberdade magnético intrínseco (spin) manipulado por um campo elétrico devido ao acoplamento spin-órbita. Esta interação, como veremos, pode ser responsável pelo efeito Hall de spin nestes sistemas.

1.2 Interação spin-órbita

A interação spin-órbita pode ser entendida como a interação do campo magnético, sentido no referencial em movimento do elétron gerado pelo campo eletrostático criado pelo próton, com o seu spin. No referencial do elétron, o campo magnético é dado por $\vec{B} = -\frac{1}{c^2}\vec{v} \times \vec{E}$. Escrevendo a energia de interação entre o momento magnético do spin com o campo magnético $-\vec{\mu}_S \cdot \vec{B}$ e o campo elétrico em termos do potencial eletrostático $V(\vec{r})$ o qual o elétron está submetido, o termo a ser adicionado ao Hamiltoniano devido a interação spin-órbita assume a seguinte forma:

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial r} (\vec{\sigma} \times \hat{r}) \cdot \vec{p}, \quad (1.1)$$

onde $\vec{p}$ e $\vec{r}$ representam os operadores momentum e posição, respectivamente e $\vec{\sigma}$ as matrizes de Pauli. Rearranjando (1.1) e usando $\vec{r} \times \vec{p} = \vec{L}$, onde $\vec{L}$ é o operador momento

angular, esta equação assume a forma usual do acoplamento $\vec{L} \cdot \vec{S}$, com $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ sendo o operador de spin. A visão dada acima é apenas pictórica, a maneira correta de derivar esse termo é fazendo aproximações não-relativísticas na equação de Dirac.

Assim como a interação spin-órbita é importante para no conhecimento do espectro de átomos e moléculas, essa interação é fundamental na determinação de estrutura de bandas em alguns sistemas. No primeiro caso, o potencial é devido ao campo elétrico gerado pelo próton, no segundo o potencial é devido a rede cristalina. Em semicondutores com assimetria de inversão espacial o Hamiltoniano para a interação spin-órbita (Rashba) que descreve elétrons na banda de condução resulta em propriedades interessantes. O espectro de energia exibe uma separação de energia dependente da orientação dos spins (spin-splitting) para cada $\vec{k}$. E ainda, os spinores dependem do momento. Logo o choque com impurezas leva a randomização da direção do spin. Outras discussões permearam o entendimento da interação spin-órbita em semicondutores (3, 4), como a origem do campo elétrico que gera essa interação (5).

Na próxima seção discutiremos o princípio de funcionamento do chamado transistor de spin Datta-Das (6), a proposta mais popular de um dispositivo spintrônico. Este usa o acoplamento spin-órbita e a variação de sua intensidade via um eletrodo (7) como peças fundamentais para o seu funcionamento.

1.2.1 Transístor Datta-Das

A proposta de Datta e Das (6) para um Spin-FET (*Spin Field Effect Transistor*) consiste em uma geometria de transistor - fonte (emissor) e dreno (coletor) conectados por um canal de elétrons - na qual o controle do dispositivo é feito via o spin eletrônico. Esse controle é proporcionado pela interação spin-órbita de Rashba a qual pode ter sua intensidade variada via um eletrodo (gate) externo (7). Isso porque a interação de Rashba pode ser vista como um campo magnético efetivo - dependente da intensidade do acoplamento - em torno do qual o spin precessiona tentando se alinhar. Logo, alterando a intensidade do acoplamento, alteramos o campo magnético efetivo permitindo a manipulação

dos spins. Assim elétrons injetados a partir de um emissor (contato ferromagnético) tem a orientação do spin controlada por um eletrodo (azul escuro na Fig. 1.1) até chegar ao coletor (ferromagnético). A orientação da magnetização do coletor atua como um filtro permitindo a passagem somente de elétrons com a orientação paralela a sua magnetização. A figura 1.1 esquematiza seu funcionamento.

Figura 1.1. Dispositivo spintrônico Datta-Das: A direção do grau de liberdade magnético do elétron (spin) é controlada por uma diferença de potencial V_g aplicada por um eletrodo externo. A intensidade de V_g pode ou não alinhar o spin do elétron com a direção de magnetização no coletor, permitindo ou não a sua entrada.

Note que a operação do transistor Datta-Das é limitada ao regime de transporte numa amostra limpa (transporte balístico), pois a interação com as impurezas altera o momento do elétron espalhado randomizando a orientação do spin. A proposta de Schliemann *et al* (8) leva em conta também a interação spin-órbita de Dresselhaus, a qual é ocorre em materiais com *bulk inversion asymmetry*. Na situação onde as intensidades de acoplamento de Rashba e Dresselhaus são iguais ($\alpha = \beta$)¹, o spinor fica independente do vetor de onda do elétron. Neste caso, o espalhamento pelas impurezas altera o vetor de onda mas não o spin dos elétrons. Dessa forma, o dispositivo proposto em (8) não mais requer transporte balístico entre a fonte e o dreno como no transistor de Datta-Das. Infelizmente, o transistor de Datta e Das ainda não foi implementado experimentalmente. Isto se deve a uma variedade de questões envolvendo injeção de spins através de interfaces (semicondutor/ferromagneto), relaxação de spin, etc.

Além de propostas para novos dispositivos devido ao controle proporcionado pela

¹Denotamos a intensidade do acoplamento por α para a interação spin-órbita de Rashba e β para a de Dresselhaus.

interação spin-órbita, esta interação pode gerar correntes de spin, fato discutido na seção seguinte.

1.3 Correntes de spin induzidas por campo elétrico

No efeito Hall ordinário, uma corrente elétrica num material condutor ou semicondutor, tem seus portadores defletidos em sentidos contrários dependendo do sinal de sua carga gerando uma diferença de potencial nas bordas da amostra (voltagem Hall). A força de Lorentz se encarrega dessa deflexão já que há um campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano formado pelo movimento da corrente (plano do campo elétrico aplicado e do campo elétrico relacionado com a voltagem Hall). Com esse efeito é possível medir a densidade dos portadores bem como o sinal de sua carga.

Devido aos trabalhos de D'yakonov e Perel (9) temos que somente a atuação de um campo elétrico pode induzir a formação de um fluxo de elétrons com spin polarizado sem que haja transporte resultante de carga (correntes de spin). Nesse caso, a interação spin-órbita, que acopla o spin e o momento dos elétrons, faz o papel da força de Lorentz sendo responsável por defletir os portadores em sentidos contrários não pelo sinal de sua carga, mas sim pela orientação de seu spin. Portanto, se aplicarmos um campo elétrico na direção y de uma placa, uma corrente com polarização de spin definida na direção negativa de z (“spin-down”) fluirá para o sentido positivo de x e spin polarizado na direção positiva de z (“spin-up”) para o sentido negativo de x . Logo, correntes de spin são geradas como resposta do sistema à aplicação de um campo elétrico

$$J_x^z(\omega) = \sigma_{xy}^z(\omega) E_y(\omega), \quad (1.2)$$

onde σ_{xy}^z é a condutividade de spin. Note que não há necessariamente transporte resultante de carga devido às correntes de spin. Debates na literatura permanecem sem solução em relação à definição para o operador densidade de corrente de spin (10–12). Há problemas também relacionados às correntes de spin não-nulas em equilíbrio termodinâmico (13)

e não conservação destas em sistemas com interação spin-órbita (10). Nesta dissertação, como veremos, utilizaremos uma extensão imediata da definição usual da corrente de spin na literatura. Não nos preocupamos aqui com as questões fundamentais acerca desta definição. Estamos interessados apenas em saber se a definição atual leva a uma condutividade de spin não-nula no modelo de nosso interesse. Mais precisamente, o operador corrente de spin usual é definido com o produto anti-simetrizado do operador de spin pela velocidade. Ou seja,

$$J_{xi}^z(\vec{q}) = \frac{1}{2} (v_{ix}(\vec{q})S_{iz} + S_{iz}v_{ix}(\vec{q})), \quad (1.3)$$

onde $\vec{q}$ denota o espaço do vetor de onda.

Devido a formação de correntes de spin, num sistema finito (Fig. 1.2) pode haver acúmulo² de spins nos extremos da amostra em x resultando numa magnetização oposta para cada borda do material. Nesse último caso devido a analogia imediata com o Efeito Hall ordinário, denominamos esse fenômeno de efeito Hall de spin. No entanto, note que não é necessária a aplicação de campo magnético para que o efeito ocorra, em contraste ao efeito Hall ordinário.

Figura 1.2. Representação pictórica do efeito Hall de Spin. As polarizações dos spins dos elétrons próximos da borda do material estão fora do plano e tem direções opostas.

Na seção seguinte apresentamos uma visão geral sobre o efeito Hall de spin.

²Não necessariamente precisa haver acúmulo já que o spin não é uma quantidade conservada em sistemas com interação spin-órbita.

1.3.1 Visão geral para o efeito Hall de spin

Os trabalhos pioneiros de D'yakonov e Perel (9) mostraram como é possível criar correntes de spin em semicondutores. Mais tarde, no mesmo contexto, Hirsch (14) cunha o termo efeito Hall de Spin (SHE, do inglês *Spin Hall Effect*) argumentando que pode haver acúmulo (magnetização não-nula) nas bordas do material. Este fato devido ao desbalanceamento da distribuição de elétrons com uma determinada polarização de spin na amostra. Esses trabalhos consideram mecanismos de espalhamento dependente de spin por impurezas semelhantes àqueles que dão origem ao efeito Hall anômalo³.

Nos anos de 2003 (15) e 2004 (16) foi proposta a possibilidade de haver efeito Hall de spin sem que houvesse a necessidade dessas impurezas, e que as propriedades intrínsecas do material seriam responsáveis por gerar correntes de spin. O efeito Hall de spin intrínseco causou grande surpresa na comunidade científica, pois a possibilidade de controle das correntes de spin seria maior, sem a necessidade de impurezas distribuídas de maneira aleatória no material para que o efeito ocorresse.

Em conjunto com correntes de spin, pode-se considerar também a contribuição da corrente de momento angular e usando teoria de perturbação de primeira ordem, obtém-se um resultado nulo para a condutividade Hall de spin, pois ambas as contribuições se cancelam (17). Correntes de spin e momento angular são analisadas mais detalhadamente em Chen *et al* (1) levando em conta as interações de Rashba e Dresselhaus.

Os cálculos acima foram feitos considerando uma amostra infinita mas em sistemas finitos a interação com os limites do material é importante, já que há espalhamento dos elétrons com as bordas criando uma magnetização dependente da geometria (18, 19).

Não só em semicondutores há trabalhos sobre correntes de spin e efeito Hall de spin. Em metais, o efeito Hall de Spin tem atraído bastante atenção, pois cálculos em platina (Pt) (20) mostram que a condutividade Hall de spin pode ser consideravelmente maior que em semicondutores. Somam-se ainda a todas essas possibilidades outras modalidades

³Em materiais ferromagnéticos, há uma maior concentração de spins orientados em uma determinada direção gerando uma voltagem nas bordas da placa somada com a voltagem produzida pelo efeito Hall ordinário.

do efeito, o efeito Hall de spin inverso (21) e o efeito Hall de spin quântico (22).

Na seção seguinte resumimos o panorama experimental para o efeito Hall de spin.

1.3.2 Detecção experimental

As primeiras observações experimentais do efeito Hall de spin foram feitas por Kato *et al* (23) em uma amostra semicondutora tridimensional e por Wunderlich *et al* (24) num gás de buracos bidimensional formado num diodo emissor de luz. Kato *et al* (23) utiliza microscopia Kerr de rotação no qual a polarização da luz, incidindo perpendicularmente na amostra de arseneto de gálio com dopagem tipo-n, é girada conforme a orientação da magnetização do material. No regime de efeito Hall de spin a magnetização tem sinais opostos nas bordas da amostra, logo, a polarização da luz incidente sofre rotações em sentidos opostos durante a medida. Engel *et al* (25) desenvolve uma teoria para correntes de spin geradas por mecanismos extrínsecos explicando alguns resultados de Kato *et al* (23). Outros trabalhos experimentais interessantes tratam da geração de correntes de spin usando o efeito Hall de spin (26) e a observação do efeito Hall de spin a temperatura ambiente (27). Em poços quânticos (28) o perfil da magnetização dos spins se revelou mais complexo que em semicondutores tridimensionais. Stern *et al* (29) estudaram a dinâmica do acúmulo analisando também o tempo de vida do spin e do efeito. Os experimentos descritos acima utilizaram propriedades óticas para estudar o efeito Hall de spin, no entanto, medidas elétricas do efeito (30) - mais especificamente do modo inverso - foram feitas injetando uma corrente de elétrons spin polarizado gerando um desbalanço de carga que pôde ser medida eletricamente. Evidências experimentais dadas até agora sugerem que o mecanismo que leva ao acúmulo de elétrons com spin polarizado é de natureza extrínseca. Somente em Brüne *et al* (31) é reportada a primeira medição do efeito no modo intrínseco para elétrons em poços de HgTe/HgTeCd.

Na próxima seção descrevemos o trabalho teórico de Sinova *et al* (16), que propuseram pela primeira vez o efeito Hall de spin intrínseco devido a interação spin-órbita de Rashba.

1.3.3 Efeito Hall de spin intrínseco

Sinova *et al* (16) foram os primeiros a calcular a condutividade Hall de spin em um 2DEG na presença da interação spin-órbita de Rashba. Apresentamos esta visão para o efeito Hall de spin intrinsecamente causado pelo espectro de Rashba quando perturbado por um campo elétrico (16). Vamos discutir esse resultado por meio de equações de movimento para a componente $\hat{z}$ do operador de spin $\vec{S}$.

O Hamiltoniano de Rashba é dado por

$$H_R = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} + \alpha \left(\vec{\sigma} \times \vec{k} \right) \cdot \hat{z}. \quad (1.4)$$

onde α denota a intensidade do acoplamento spin-órbita. Este Hamiltoniano (1.4) possui os autovalores

$$\epsilon_{k\mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \mu \alpha k, \quad (1.5)$$

onde $\mu = \pm$ denota cada ramo do espectro. Os auto-vetores são dados por

$$|k\mu\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i\mu \frac{k_+}{k} \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

na base de spin $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ com o eixo de quantização escolhido na direção z e $k_{\pm} = k_x \pm i k_y$. Note que os autoestados do Hamiltoniano de Rashba é dependente do momentum. Podemos reescrever o termo de Rashba na equação (1.4) como um termo do tipo Zeeman

$$H_R = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} + \frac{1}{2} g \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}(\vec{k}), \quad (1.7)$$

onde g é o fator giromagnético e μ_B é o magnetón de Bohr. Com $\vec{B}(\vec{k})$ sendo o campo magnético efetivo dependente do momento

$$B(\vec{k})_{ef} = \frac{2\alpha}{g\mu_B} (k_y \hat{x} - k_x \hat{y}). \quad (1.8)$$

Calculando o valor esperado para as componentes do operador de spin S_z , S_x e S_y nos auto-estados do Hamiltoniano de Rashba, temos

$$\begin{aligned}\langle k\mu | S_z | k\mu \rangle &= 0, \\ \langle k\mu | S_x | k\mu \rangle &= \mu \frac{\hbar k_y}{2k}, \\ \langle k\mu | S_y | k\mu \rangle &= -\mu \frac{\hbar k_x}{2k},\end{aligned}\tag{1.9}$$

o que mostra que o valor esperado do operador de spin $\vec{S}$ permanece no plano do gás de elétrons. Escrevendo em termos de coordenadas polares as componentes das direções não-nulas, x e y na equação (1.10), temos a componente total

$$\langle k\mu | \vec{S} | k\mu \rangle_{\theta\mu} = \langle k\mu | \vec{S}_x | k\mu \rangle_{\theta\mu} \hat{x} + \langle k\mu | \vec{S}_y | k\mu \rangle_{\theta\mu} \hat{y},\tag{1.10}$$

que em cada ramo é dada por:

$$\langle k\mu | \vec{S} | k\mu \rangle_{\theta+} = \frac{\hbar}{2} (\sin\theta \hat{x} - \cos\theta \hat{y})\tag{1.11}$$

e

$$\langle k\mu | \vec{S} | k\mu \rangle_{\theta-} = \frac{\hbar}{2} (-\sin\theta \hat{x} + \cos\theta \hat{y})\tag{1.12}$$

O posicionamento dos valores médios para as componentes de spin (em função de k_x e k_y) são mostradas na figura 1.3, numa visão paralela ao eixo z .

Escrevendo a equação de Heisenberg para a componente de spin na direção $\hat{z}$ encontramos o torque $\frac{dS_z}{dt}$ gerado nessa componente pelo campo magnético efetivo

$$\frac{dS_z}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [S_z, H_R] = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \left\{ \vec{S}(t) \times \vec{B}_{ef} \right\} \cdot \hat{z}.\tag{1.13}$$

Note que o campo magnético efetivo (1.8) depende do produto vetorial $\vec{k} \times \hat{z}$, logo sua direção está no plano xy e perpendicular ao vetor $\vec{k}$ assim como a direção para a componente total do spin (1.10). Mais especificamente, o spin está alinhado paralelamente

Figura 1.3. Valores médios para a direção de spin num corte no plano de k_x e k_y das auto-energias para o Hamiltoniano de Rashba, μ denota o ramo desse espectro.

com o campo magnético efetivo no ramo $\mu = +$ e antiparalelamente no ramo $\mu = -$, anulando assim a expressão (1.13). Aplicando-se um campo elétrico paralelamente a $\hat{y}$ a superfície de Fermi se desloca por uma quantidade δk_y , com $\delta k_y = -e \frac{\delta E_y}{\hbar} \tau$, onde τ é o tempo decorrido de atuação do campo elétrico até o choque com alguma impureza do sistema. O campo magnético efetivo após a aplicação do campo elétrico é determinado substituindo δk_y na (1.8) resultando em

$$\vec{B}_{ef}(\vec{k}, t) = \frac{2\alpha}{g\mu_B} (k_y \hat{x} - k_x \hat{y}) + \frac{2\alpha}{g\mu_B} \delta k_y \vec{x}. \quad (1.14)$$

Anteriormente a aplicação do campo, componentes de momento e da média do spin estavam orientadas perpendicularmente. Com a perturbação agindo o deslocamento da superfície de Fermi faz com que isso não seja mais verdade e a componente de spin precessiona em torno do campo magnético efetivo tentando se alinhar com ele. Pela equação (1.13) com o campo magnético efetivo dado pela (1.14), essa tentativa de alinhamento possui componentes fora do plano xy . Outro ponto crucial é que dependendo do sinal de k_x esse alinhamento toma a direção positiva ou negativa do eixo z . As figuras 1.4 e 1.5 mostram o resultado obtido pelas equações (1.11) e (1.12) num corte do plano formado por k_x e k_y . As linhas pontilhadas mostram a superfície de Fermi deslocada devido a ação

situação se inverte e para cada valor de k_x , positivo ou negativo, o alinhamento se dá na direção contrária a do ramo $\mu = +$. A figura 1.6 mostra essa situação de alinhamento do spin no espectro de Rashba.

Figura 1.6. Alinhamento dos spins no espectro de Rashba devido a aplicação de um campo elétrico $\vec{E} = E\hat{y}$. Anteriormente a aplicação de $\vec{E}$, a direção do valor médio do spin (seta roxa) está alinhado com o campo magnético efetivo $B_{ef}(\vec{k})$. O campo elétrico $\vec{E}$ aplicado faz o disco de Fermi se mover por uma distância δk_y alterando o $B_{ef}(\vec{k})$. O spin tenta se alinhar saindo do plano na direção positiva de k_z (seta vermelha contínua) ou na direção negativa de k_z (seta vermelha pontilhada). Adaptado da referência (1).

Em uma pequena faixa de energia próxima a energia de Fermi (ϵ_F), o ramo $\mu = -$ está mais ocupado que o ramo $\mu = +$. Isso ocorre devido a densidade de estados no ramo $\mu = -$ ser maior que a do ramo $\mu = +$. Assim, apesar de levar a direções de polarização de spin em relação a z , a maior quantidade de elétrons em $\mu = -$ ocupando essa faixa próxima a ϵ_F faz com que a sua configuração seja a resultante.

Assim, os argumentos presentes em Sinova *et al* (16) concluem que num sistema descrito pelo Hamiltoniano de Rashba pode haver geração de correntes de spin e possivelmente acúmulo (mas não há prova dessa relação). No entanto, o trabalho de Inoue *et al* (32) conclui que nesses sistemas a condutividade Hall de spin é nula na presença de impurezas não-magnéticas. Rashba (33) prova ainda que o resultado se anula no limite balístico. Na próxima seção repetiremos os argumentos de Chalaev e Loss (34) e Dimitrova (35) provando que a condutividade Hall de spin é nula no regime estacionário.

1.3.4 Argumento simples para $\sigma_{xy}^z = 0$ no modelo de Rashba

Como já dito, o trabalho de Inoue *et al* (32) conclui que a condutividade Hall de spin é nula na presença de impurezas não-magnéticas. Este trabalho toma como hipótese que as impurezas estão homogeneamente distribuídas. Dimitrova (35) e Chalaev e Loss (34) calculam σ_{xy}^z e estendem o resultado nulo obtido referência (32) para qualquer quantidade de impurezas. Adicionalmente, as referências (35) e (34) apresentam argumentos simples da razão de $\sigma_{xy}^z = 0$ no regime estacionário. Esses argumentos serão reproduzidos abaixo.

Para o Hamiltoniano de Rashba (1.4), o operador densidade de corrente de spin (1.3) se torna

$$J_x^z = \frac{\hbar^2}{2} \frac{k_x \sigma_z}{m}. \quad (1.15)$$

Da equação de Heisenberg para o operador de spin S_x , componente em x de $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$, temos

$$\frac{dS_x(t)}{dt} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2}{2} \frac{k_x \sigma_z}{m} \right). \quad (1.16)$$

A equação (1.16) relaciona a precessão do spin na direção x com a corrente de spin. Ou seja,

$$\frac{dS_x(t)}{dt} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} J_x^z, \quad (1.17)$$

Tomando o valor esperado dos operadores nos autoestados do problema com impurezas, temos que na presença de impurezas a dinâmica dos spins eventualmente atinge um estado estacionário, isto é, $\langle \frac{dS_x}{dt} \rangle = 0$. Logo, o lado direito da equação (1.17) deve ser nulo implicando em $\langle J_x^z(t) \rangle = 0$. Tendo em vista que o campo elétrico é diferente de zero e independente do tempo (limite $\omega \rightarrow 0$), temos que $\sigma_{xy}^z(\omega = 0) = 0$. Concluimos que a condutividade de spin σ_{xy}^z é nula num sistema descrito pelo Hamiltoniano de Rashba com impurezas, não importando a quantidade delas (34)⁴.

⁴A condutividade Hall de spin também se anula num gás de elétrons bidimensional descrito Hamilto-

1.4 Motivações para o cálculo de σ_{xy}^z

Diante do panorama de discussões sobre efeito Hall de spin, mais ainda, sobre a possibilidade de criar correntes de spin sem a presença de impurezas e a carência de observações experimentais, nosso trabalho é motivado pelas referências (36) e (37) que investigaram a interação spin-órbita em poços quânticos com duas subbandas. Seria esta nova interação capaz de resultar em uma condutividade Hall de spin não-nula, em contraste com Rashba?

Organizamos a dissertação como explicado a seguir. No capítulo 2 introduziremos a dedução para o Hamiltoniano spin-órbita inter-subbanda (36, 37) e derivamos as expressões para a intensidade do acoplamento spin-órbita em poços de potencial simétricos. Esta interação induzida pelo acoplamento entre as subbandas, ao contrário de Rashba, é não-nula mesmo em poços simétricos. Interessantemente esta ainda induz *Zitterbewegung* com trajetórias cicloidais. Em seguida, no capítulo 3, calcularemos a condutividade Hall de spin usando teoria de resposta linear e obteremos um valor não-nulo dependente a intensidade do acoplamento spin-órbita inter-subbanda η . No capítulo 4, realizamos um cálculo autoconsistente para encontrarmos valores para η que levem a valores mensuráveis para σ_{xy}^z . Nossas simulações mostram que os resultados são da ordem de $\frac{1}{1000} \frac{e}{8\pi}$ para σ_{xy}^z em poços simples de InSb.

niano de Dresselhaus linear em $\vec{k}$, ou seja, $H_D = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} + \beta(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y)$.

Capítulo 2

Hamiltoniano spin-órbita inter-subbanda

Neste capítulo introduziremos o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ e em particular o modelo de Kane 8×8 ¹. A partir do modelo de Kane reproduzimos de forma breve a dedução de um Hamiltoniano efetivo spin-órbita em poucos quânticos. Nosso intuito é considerar duas subbandas no poço quântico obtendo um novo termo de interação spin-órbita inter-subbanda (36). Como mencionamos, este termo dá origem a uma condutividade Hall de spin não-nula.

2.1 Formulação do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Para uma sucinta dedução do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, partimos de um Hamiltoniano de partícula única para um elétron num potencial periódico $V(\vec{r})$ considerando o termo de interação spin-órbita

$$\left\{ \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \left(\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r}) \right) \cdot \vec{p} \right\} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \epsilon_{n,\vec{k}} \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.1)$$

com m_0 sendo a massa do elétron em repouso. O teorema de Bloch nos diz que os autovetores para o Hamiltoniano (2.1) podem ser escritos como

¹Esta dedução e análise feita em detalhes pode ser encontrada em Calsaverini *et al* (37) e em Calsaverini (38)

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.2)$$

onde n denota as soluções para cada $\vec{k}$. Logo cada n define uma banda. O Hamiltoniano se separa então em dois termos, o primeiro equivalente a equação (2.1) com $\vec{k} = 0$ que identificamos como $H(\vec{k} = 0)$, e o segundo que identificamos como um termo perturbativo dependente de $\vec{k}$, $W(\vec{k})$. Explicitamente temos

$$\left(H(\vec{k} = 0) + W(\vec{k}) \right) u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \left(\epsilon_{n\vec{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) u_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.3)$$

onde

$$H(\vec{k} = 0) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \left(\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r}) \right) \cdot \vec{p} \quad (2.4)$$

e

$$W(\vec{k}) = \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \left(\vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \left(\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r}) \right) \right). \quad (2.5)$$

Vamos escrever o Hamiltoniano (2.3) na base de soluções de $H(\vec{k} = 0)$, que equivale ao ponto Γ . Substituindo a expansão $u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{l=1}^N a_{nl}(\vec{k}) u_{l0}(\vec{r})$, que satisfaz $H(\vec{k} = 0) u_{l0}(\vec{r}) = \epsilon_{l0} u_{l0}(\vec{r})$, no Hamiltoniano (2.3) e projetando nos auto-estados de $u_{l'0}(\vec{r})$, ficamos com uma equação matricial na base do problema não-perturbado

$$\sum_{l=1}^N \left[\left(\epsilon_{l0} - \epsilon_{n\vec{k}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{ll'} + \langle l' | \frac{\hbar}{m_0} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \vec{k} \cdot \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r}) | l \rangle \right] a_{nl}(\vec{k}) = 0. \quad (2.6)$$

Note que em princípio l pode variar por todos os números inteiros positivos ($N \rightarrow \infty$).

Seguimos na próxima seção com o modelo de Kane para o caso bulk.

2.2 Modelo de Kane 8×8 - caso bulk

Na prática, para resolver o problema de diagonalização da equação matricial (2.6), considera-se apenas um número finito de estados. Então, precisamos encontrar a base de autoestados de $H(\vec{k} = 0)$ (2.4). A presença do acoplamento spin-órbita no Hamiltoniano (2.4) sugere que podemos escolher uma combinação linear da base de $|s\rangle |\uparrow\downarrow\rangle$ e $|p_i\rangle |\uparrow\downarrow\rangle$, com $i = x, y, z$ denotando a simetria dos orbitais s e p e $|\uparrow\downarrow\rangle$ indicando a base de spin com eixo de quantização na direção z . Essa combinação linear é escolhida de modo a ser autoestado do momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ (número quântico J) e sua componente J_z (número quântico m_J), com spin $\vec{S}$ e momento angular $\vec{L}$. Escrevendo o Hamiltoniano completo (2.3) na base que diagonaliza² (2.4) ficamos com

$$H_{8 \times 8} = \begin{pmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{vc} & H_v \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Com H_c sendo

$$H_c = \begin{pmatrix} \epsilon_{l0} & 0 \\ 0 & \epsilon_{20} \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Onde ϵ_{l0} e ϵ_{20} são as autoenergias do termo (2.4) atuando nas funções de Bloch u_{l0} . Definimos essas autoenergias com o valor nulo. Os termos restantes da diagonal da equação (2.7) ficam $\epsilon_{30} = \epsilon_{40} = \epsilon_{50} = \epsilon_{60} = -E_g$ e $\epsilon_{70} = \epsilon_{80} = -E_g - \Delta_g$. A energia do *gap* E_g denota a diferença de energia do topo da banda de valência até o fundo da banda de condução para o ponto Γ (em *bulk*). Para o mesmo ponto, a energia de *split-off* Δ_g ³ denota a diferença de energia entre a banda de valência e a banda de split-off. Matricialmente temos

²A base $|J, m_J\rangle$ que escrevemos o Hamiltoniano (2.7) é ordenada da seguinte forma: $|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$

³O termo Δ_g surge quando vamos encontrar a base que diagonaliza o Hamiltoniano (2.4). Argumentos de simetria mostram os elementos de matriz do termo spin-órbita $H_{SO} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})) \cdot \vec{p}$ são não-nulos somente quando aparecem termos do tipo $\frac{3\hbar^2}{4c^2m^2} \langle p_x | \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} | p_y \rangle \equiv \Delta_g$

$$H_v = \begin{pmatrix} (-E_g) 1_{4 \times 4} & 0 \\ 0 & (-E_g - \Delta) 1_{2 \times 2} \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

O termo fora da diagonal H_{cv} é dado por

$$H_{cv} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_- & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_- \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_- & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

com $H_{cv} = H_{cv}^\dagger$ garantindo a hermiticidade do Hamiltoniano (2.7). Ainda $k_\pm = k_x \pm ik_y$ e $P = -\frac{i\hbar}{m_0} \langle s | p_i | p_i \rangle$ são os elementos de matriz de Kane com p_i sendo o operador momentum e $|p_i\rangle$ os orbitais com simetria p nas direções $i = x, y, z$. A equação (2.7) é denominada Hamiltoniano 8×8 de Kane.

Na próxima seção discutiremos a aplicação do modelo de Kane em heteroestruturas com o intuito de obter um Hamiltoniano efetivo para os elétrons num poço quântico com duas subbandas. Nesses sistemas surge um termo adicional de interação spin-órbita que vamos deduzir.

2.3 Modelo de Kane para heteroestruturas

Em heteroestruturas a periodicidade do cristal é quebrada, assim precisamos adequar nossos resultados da seção 2.1 para poços quânticos. Para isso, usamos a aproximação da função envelope (39). Para uma heteroestrutura crescida na direção $\hat{z}$ usamos o *Ansatz* $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_n F_n(\vec{r}) u_{n,\vec{k}=0}(\vec{r})$ em vez da (2.2). Repetindo toda a derivação temos que adicionar o potencial estrutural na diagonal de $H_{8 \times 8}$ (2.7) e fazer $k_z \rightarrow \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ tornando o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ válido para heteroestruturas.

Para adicionarmos o potencial estrutural aos termos da diagonal de $H_{8 \times 8}$ (2.7) devemos descrever o perfil estrutural gerado por cada banda considerada (condução, valência e *split-off*). Assim, utilizando os offsets dos potenciais, descrevemos o potencial que reproduz a

banda de condução $\Phi_c(z)$, valência $\Phi_v(z)$ e a banda de *split-off* $\Phi_\Delta(z)$, ou seja,

$$\begin{aligned}\Phi_c(z) &= V(z) + \delta_c h(z) + \delta_c^b h_b(z), \\ \Phi_v(z) &= V(z) - \delta_v h(z) - \delta_v^b h_b(z), \\ \Phi_\Delta(z) &= V(z) - \delta_\Delta h(z) - \delta_\Delta^b h_b(z).\end{aligned}\tag{2.11}$$

Note que adicionamos ao potencial estrutural um termo relativo ao potencial de Hartree $V(z)$, potencial eletrostático gerado pela presença de muitos elétrons no poço, que será calculado de maneira auto-consistente⁴. Os termos $h(z)$ e $h_b(z)$ descrevem o perfil de um poço com altura igual a unidade com a largura do poço e da barreira, respectivamente. Chamamos de poço quântico principal (grandezas com índices c) a estrutura ilustrada pela figura 2.1 sem a barreira central.

Figura 2.1. Perfis estruturais criados pela offsets da banda de condução (roxo), banda de valência (azul) e banda de *split-off* (verde) da heteroestrutura.

Seguimos na próxima seção com a dedução do Hamiltoniano efetivo spin-órbita inter-subbanda. Esse termo surge quando levamos em conta duas subbandas no poço quântico. A intensidade desse acoplamento é não-nula mesmo em poços simétricos, em contraste com Rashba.

⁴No capítulo 4 há uma descrição mais detalhada sobre a simulação.

2.4 Hamiltoniano efetivo com interação spin-órbita inter-subbanda

Como estamos interessados nos efeitos da interação spin-órbita para os elétrons da banda de condução vamos deduzir um Hamiltoniano efetivo para eles. A partir do Hamiltoniano 8×8 (2.7) podemos escrever um Hamiltoniano efetivo 2×2 para um elétron na banda de condução. Este procedimento é denominado *folding down*. Isolando a parte relativa a essa banda em (2.7) ficamos com um Hamiltoniano efetivo $H_{ef} = H_c + H_{cv}(E - H_v)^{-1} H_{vc}$. Abrindo o Hamiltoniano efetivo ficamos com termos dependentes das razões $\frac{1}{E_g}$ e $\frac{1}{E_g + \Delta}$. Como E_g e Δ são as maiores energias envolvidas, sua razão com outras energias permite que façamos expansões dessas expressões guardando os termos de mais baixa ordem que contribuem com o Hamiltoniano⁵. Definindo $\eta(z) = \frac{P^2}{3} \left(\frac{1}{E_g^2} \frac{d\Phi_v(z)}{dz} - \frac{1}{(E_g + \Delta)^2} \frac{d\Phi_\Delta(z)}{dz} \right)$, sendo Φ o perfil de potencial (ver equação (2.12)). O Hamiltoniano efetivo assume a forma

$$H_{ef} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m_0} + V_c(z) + V(z) + \frac{P^2}{3} (k_{//}^2 + k_z^2) \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right) + \Phi_c + \eta(z) \hat{z} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{k}_{//}), \quad (2.12)$$

onde podemos definir uma massa efetiva para o elétron na banda de condução agrupando os termos quadráticos para a diagonal do Hamiltoniano

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2P^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right). \quad (2.13)$$

Temos finalmente

$$H_{ef} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m^*} + \Phi_c + \eta(z) \hat{z} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{k}_{//}). \quad (2.14)$$

Para chegarmos a um modelo bidimensional efetivo que inclua a interação spin-órbita vamos projetar o Hamiltoniano (2.14) tridimensional em uma base finita. Vamos usar

⁵Para mais detalhes sobre as passagens veja Calsaverini (38)

as soluções do problema (2.14) sem spin-órbita, mais a parte de spin (degenerada) relacionadas com as 2 subbandas de energias mais baixas. A equação de Schrödinger que descreve o elétron na sua direção de confinamento e é dado por

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi_i(z)}{dz^2} + \Phi_c(z)\psi_i(z) = E_i\psi_i(z), \quad (2.15)$$

onde $\langle \vec{r} | i \rangle = \psi_i(z)$. O perfil $\Phi_c(z) = V(z) + \delta_c h(z) + \delta_c^b h_b(z)$ descreve a banda de condução (Eq.(2.12)). Vamos então escrever o Hamiltoniano (2.14) usando a base $|\vec{k}_{//}, i\rangle | \sigma_z \rangle$ com $\langle \vec{r} | \vec{k}_{//}, i \rangle = \langle \vec{r} | \vec{k}_{//}, i \rangle = \exp(i\vec{k}_{//} \cdot \vec{r}_{//})\psi_i(z)$, onde i é o índice para cada subbanda: $i = e$ e $i = o$, para primeira e segunda subbandas, respectivamente.

Para o caso de um potencial simétrico, escolhemos a disposição da base $\{|e \uparrow\rangle, |e \downarrow\rangle, |o \uparrow\rangle, |o \downarrow\rangle\}$. O Hamiltoniano (2.14) assume a forma

$$H = \left(\frac{p^2}{2m^*} + \bar{\epsilon} \right) 1 \otimes 1 - \frac{\Delta\epsilon}{2} \tau_z \otimes 1 + \frac{\eta}{\hbar} \tau_x \otimes (p_x \sigma_y - p_y \sigma_x), \quad (2.16)$$

onde $\Delta\epsilon = \epsilon_o - \epsilon_e$ e $\vec{\tau}$ indica as matrizes de Pauli para o pseudospin relacionado as duas subbandas de energia. Além disso usamos $\langle \mp | \hat{z} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{k}_{//}) | \pm \rangle = \mp i k_{\pm}$, o produto direto $\otimes$ e denotamos a intensidade do acoplamento spin-órbita inter-subbanda por $\eta = \langle e | \eta(z) | o \rangle$. Note que as intensidades dos termos relativos à Rashba em cada subbanda são nulas num potencial simétrico, o que não ocorre com η .

As expressões para η num poço simétrico se separam em contribuições devido ao potencial de Hartree η_H , ao potencial do poço quântico principal η_w e ao potencial da barreira η_b . A intensidade do acoplamento spin-órbita inter-subbanda total é dada pela soma das três contribuições $\eta = \eta_H + \eta_w + \eta_b$. Separadamente ficamos com

$$\eta_H = \frac{P^2}{3} \left(\frac{1}{E_g^2} - \frac{1}{(E_g + \Delta)^2} \right) \langle e | V'(z) | o \rangle, \quad (2.17)$$

$$\eta_w = -\frac{P^2}{3} \left(\frac{\delta_v}{E_g^2} - \frac{\delta_\Delta}{(E_g + \Delta)^2} \right) \langle e | h'(z) | o \rangle \quad (2.18)$$

$$\eta_b = -\frac{P^2}{3} \left(\frac{\delta_v^b}{E_g^2} - \frac{\delta_\Delta^b}{(E_g + \Delta)^2} \right) \langle e | h'_b(z) | o \rangle. \quad (2.19)$$

Esses termos serão calculados via cálculo autoconsistente (ver capítulo 4). Interessantemente, como em Rashba, podemos variar o valor de η via eletrodos externos (37). Para tópicos como renormalização da massa efetiva e diagonalização do Hamiltoniano spin-órbita intersubbanda no caso simétrico e na presença de assimetria, consultar Calsaverini (38).

Na seção seguinte vamos resolver o Hamiltoniano (2.16) para o caso de um campo magnético aplicado transversalmente ao gás de elétrons bidimensional. Os autovalores e autovetores encontrados serão usados no cálculo da condutividade Hall de spin σ_{xy}^z .

2.5 Aplicação do campo magnético ao Hamiltoniano spin-órbita inter-subbanda.

Para o cálculo da condutividade Hall de spin usaremos o método desenvolvido por Rashba (33). Este método consiste em calcular a condutividade Hall de spin num sistema com campo magnético $\vec{B}$ aplicado e tomar o limite $B \rightarrow 0$ somente no final do cálculo. Ainda para este cálculo que faremos no capítulo 3 vamos precisar das autoenergias e autovetores do Hamiltoniano (2.16) com campo magnético aplicado. Iniciamos esse cálculo reordenando a base do Hamiltoniano (2.16) para $\{|e \uparrow\rangle, |o \downarrow\rangle, |o \uparrow\rangle, |e \downarrow\rangle\}$, o mesmo adquire a forma bloco-diagonal⁶

$$H = \begin{pmatrix} \frac{p^2}{2m^*} + \epsilon_e & -i\eta \frac{p_-}{\hbar} & 0 & 0 \\ +i\eta \frac{p_+}{\hbar} & \frac{p^2}{2m^*} + \epsilon_o & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{p^2}{2m^*} + \epsilon_o & -i\eta \frac{p_-}{\hbar} \\ 0 & 0 & +i\eta \frac{p_+}{\hbar} & \frac{p^2}{2m^*} + \epsilon_e \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

A inclusão de um campo magnético $\vec{B}$ ao problema é feita via substituição $\vec{p} \rightarrow \vec{\Pi} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$,

⁶Para a solução do Hamiltoniano (2.20) ver Bernardes *et al* (36) ou Calsaverini *et al* (37).

onde $\vec{A}$ é o potencial vetor tal que $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$. Dessa maneira a equação (2.20) em cada subespaço λ , $\mathfrak{S}_+ = \{|e \uparrow\rangle, |o \downarrow\rangle\}$ e $\mathfrak{S}_- = \{|o \uparrow\rangle, |e \downarrow\rangle\}$, se reduz a

$$H_{\mathfrak{S}_\lambda} = \frac{\vec{\Pi}^2}{2m^*} + \bar{\epsilon} - \begin{pmatrix} \lambda \frac{\Delta\epsilon}{2} & \eta \frac{\Pi_y + i\Pi_x}{\hbar} \\ \eta \frac{\Pi_y - i\Pi_x}{\hbar} & -\lambda \frac{\Delta\epsilon}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

onde $\bar{\epsilon} = \frac{\epsilon_o + \epsilon_e}{2}$. Reescrevendo o Hamiltoniano acima em termos das matrizes de Pauli $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ e da matriz identidade $1_{2 \times 2}$ temos

$$H_{\mathfrak{S}_\lambda} = \left(\frac{\vec{\Pi}^2}{2m^*} + \bar{\epsilon} \right) 1_{2 \times 2} + \frac{\eta}{\hbar} (\Pi_x \sigma_y - \Pi_y \sigma_x) + \lambda \frac{\Delta\epsilon}{2} \sigma_z. \quad (2.22)$$

Note que o Hamiltoniano 2.22 assume a mesma forma do Hamiltoniano de Rashba (1.4), com uma intensidade de acoplamento spin-órbita η e um termo semelhante à interação Zeeman. Tal analogia é direta se fizermos as substituições $\eta \rightarrow \alpha$ e $\lambda \frac{\Delta\epsilon}{2} \rightarrow \frac{g\mu_B B}{2}$.

Vamos usar o calibre de Landau $\vec{A} = (-y, 0, 0) \vec{B}$, que leva a $B\hat{z} = \nabla \times \vec{A}$, para resolver o Hamiltoniano (2.22). Note que $[H, p_x] = 0$ e portanto $k_x = \frac{p_x}{\hbar}$ continua sendo um bom número quântico para descrevermos um auto-estado do Hamiltoniano (2.22). Sabemos que uma partícula livre sujeita à um campo magnético tem seu espectro quantizado em níveis de Landau com autofunções do oscilador harmônico $|n\rangle$. Conhecemos também como os operadores de criação e destruição atuam na base $|n\rangle$. Assim vamos reescrever (2.22) em termos desses operadores e diagonalizá-lo encontrando auto-estados escritos como combinações lineares de $|n\rangle$ e da base de spin $|\uparrow\downarrow\rangle$. Definindo então o operador de destruição a

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{l_b}{\hbar} (\Pi_x + i\Pi_y). \quad (2.23)$$

com o operador criação $a^\dagger$ sendo simplesmente o complexo conjugado de a e $l_b = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$ sendo o comprimento magnético com e sendo a carga do elétron. Estes operadores satisfazem $[a, a^\dagger] = 1$ e atuam na base como $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ e $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$. Em termos desses operadores o Hamiltoniano (2.22) fica

$$H_{\mathfrak{S}_\lambda} = \hbar\omega_c \left(aa^\dagger + \frac{1}{2} \right) + \frac{\eta}{l_b} \frac{i}{\sqrt{2}} (a\sigma^- - a^\dagger\sigma^+) + \lambda \frac{\Delta\epsilon}{2} \sigma_z, \quad (2.24)$$

onde $\omega_c = \frac{eB}{mc}$ é a frequência cíclotron e $\sigma^\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y$. Note que $\sigma^\pm |\mp\rangle = 2|\pm\rangle$. Escrevemos o Hamiltoniano (2.24) na base $|e, n, \uparrow\rangle$ e $|o, n, \downarrow\rangle$ para o subespaço $\lambda = +$ e na base $|o, n, \uparrow\rangle$ e $|e, n, \downarrow\rangle$ para o subespaço $\lambda = -$, onde n abrange todos os níveis de Landau. Dessa maneira, ficamos então com uma matriz infinita mas bloco-diagonal como pode ser visto na figura 2.2. Diagonalizando cada um desses blocos determinamos o espectro para o Hamiltoniano (2.24) em cada subespaço λ . Assim, temos as autoenergias

$$\epsilon_{\lambda n \mu} = \bar{\epsilon} + \hbar\omega_c (n - \mu\gamma_{\lambda n}), \quad (2.25)$$

com auto-vetores para cada ramo μ ,

$$|\lambda n +\rangle = \sin \frac{\theta_{\lambda n}}{2} |e, n \uparrow\rangle - i \cos \frac{\theta_{\lambda n}}{2} |o, n - 1 \downarrow\rangle \quad (2.26)$$

e

$$|\lambda n -\rangle = -\cos \frac{\theta_{\lambda n}}{2} |o, n \uparrow\rangle - i \sin \frac{\theta_{\lambda n}}{2} |e, n - 1 \downarrow\rangle. \quad (2.27)$$

Onde $\sin \theta_{\lambda n} = \frac{\sqrt{n\epsilon_{SO}}}{\gamma_{\lambda n}}$ e $\cos \theta_{\lambda n} = \frac{\varsigma_\lambda}{\gamma_{\lambda n}}$, com as definições $\varsigma_\lambda = \frac{(1-\lambda\epsilon_g)}{2}$ e $\gamma_{\lambda n} = \sqrt{n\epsilon_{SO} + \varsigma_\lambda^2}$. Estas expressões dependem de parâmetros adimensionais relativos a constante de acoplamento spin-órbita $\epsilon_{SO} = \frac{2m\eta^2}{\hbar^3\omega_c}$ e relativos a diferença entre as energias da primeira e segunda subbandas $\epsilon_g = \frac{\Delta\epsilon}{\hbar\omega_c}$, com $\Delta\epsilon = \epsilon_o - \epsilon_e$ e a média dessas energias $\bar{\epsilon} = \frac{\epsilon_o + \epsilon_e}{2}$.

No capítulo 3 introduziremos a teoria geral de resposta linear depois aplicaremos o formalismo desenvolvido no cálculo da condutividade Hall de spin σ_{xy}^z em sistemas descritos pela interação spin-órbita inter-subbanda.

$$\begin{array}{c}
 \cdots \quad \begin{array}{cc} |b_1, N, \uparrow\rangle & |b_2, N-1, \downarrow\rangle \end{array} \\
 \left[\begin{array}{cc} \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \bar{\varepsilon} - \lambda \frac{\Delta\varepsilon}{2} & -i \frac{\sqrt{2}\eta}{l_b} \sqrt{n} \\ i \frac{\sqrt{2}\eta}{l_b} \sqrt{n} & \hbar\omega_c \left(n - \frac{1}{2} \right) + \bar{\varepsilon} + \lambda \frac{\Delta\varepsilon}{2} \end{array} \right] \cdots
 \end{array}$$

Figura 2.2. Bloco da matriz formada pela projeção do Hamiltoniano (2.24) na base de spin e de auto-funções do oscilador harmônico. Usamos $(b_1, b_2) = (e, o)$ para $\lambda = +$ e $(b_1, b_2) = (o, e)$ para $\lambda = -$ ordenando a base para cada subespaço.

Capítulo 3

Resposta Linear aplicada à correntes de spin: condutividade Hall de spin

3.1 Introdução

Aqui fazemos uma introdução à teoria de resposta linear e aplicamos a mesma no cálculo da condutividade Hall de spin σ_{xy}^z em poços quânticos com duas subbandas. Veremos que nesses sistemas a condutividade Hall de spin σ_{xy}^z é não-nula, sofre inversão de sinal e possui um comportamento não-monótono. No capítulo 4 realizamos cálculos auto-consistente a fim de encontrarmos valores realistas para σ_{xy}^z . Contudo os cálculos iniciais mostram que σ_{xy}^z é extremamente pequeno em poços realistas.

Estamos interessados em calcular a resposta de uma amostra - expressa por meio do valor médio de um observável - devido a uma perturbação agindo sobre o sistema. O valor médio desse observável pode ser expandido em função de um campo associado a essa perturbação. O coeficiente dessa expansão em ordem linear, é identificado como a função resposta. Tomando como hipótese que o experimental perturbe o sistema fracamente, o termo linear é o mais significativo e o único que será levado em conta nos cálculos.

De forma geral,

$$A_\alpha(r, t) = \int_V d^3r' \int_{t_0}^{\infty} dt' \chi_{\alpha\beta}(r - r', t - t') F_\beta(r', t'), \quad (3.1)$$

onde A é o observável, $\chi_{\alpha\beta}(r - r', t - t')$ é a função resposta linear, $F(r', t')$ é o campo perturbativo e α e β são direções no espaço (x, y ou z em coordenadas cartesianas). A equação (3.1) nos diz que o valor médio do observável $A_\alpha(\vec{r}, t)$ é determinado pelos valores do campo perturbativo na amostra nos instantes anteriores a medida. As contribuições em cada instante e posição são pesadas pela função resposta. Como veremos, a equação (3.1) assumirá a forma de uma convolução entre a função resposta $\chi_{\alpha\beta}(r - r', t - t')$ e o campo perturbativo $F(r', t')$. Essa forma nos permitirá obter uma relação linear entre o observável e o campo perturbativo ($\langle A \rangle(q, \omega) = \chi(q, \omega)F(q, \omega)$) como requeridas pelas hipóteses no caso de uma perturbação fraca.

Exemplos dessa dependência linear são encontradas em todas as áreas da física, por exemplo, a susceptibilidade magnética (elétrica) é a função resposta associada a magnetização (polarização) do sistema devido a um campo magnético (elétrico) aplicado. A condutividade elétrica é a resposta do sistema devido a um campo elétrico aplicado que gera uma densidade de corrente de carga. Em suma, para cada possível perturbação num sistema temos uma função resposta associada. Em nosso problema, temos uma situação semelhante a correntes de carga, no entanto, analisaremos elétrons se movendo numa direção preferencial dependendo da orientação do seu spin sem que haja necessariamente transporte resultante de carga. Estas são denominadas correntes de spin e são analisadas mais detalhadamente no capítulo 1. Vamos relacionar linearmente o valor médio do operador densidade de corrente de spin com o campo elétrico externo aplicado e identificaremos nossa função resposta como a condutividade Hall de spin. Equacionando ficamos com $J_\alpha^{\hat{n}} = \sigma_{\alpha\beta}^{\hat{n}} E_\beta$, onde $\hat{n}$ é a orientação paralela à polarização da corrente.

3.2 Teoria da Resposta Linear

Seja o Hamiltoniano completo do sistema descrito por dois termos, um termo H_0 independente do tempo e um termo perturbativo dependente do tempo $W(t)$. O Hamiltoniano completo explicitamente escrito é uma soma de Hamiltonianos de partículas únicas não-interagentes, por simplicidade a interação elétron-elétron não será incluída. Sendo assim, o Hamiltoniano fica:

$$H = \sum_{i=1}^N H_{0i} + W_i(t) = H_0 + W(t)\Theta(t_0) = H_0 + BF(t)\Theta(t_0), \quad (3.2)$$

onde $\Theta(x)$ é a função Heaviside. Assumimos conhecidos os autovalores e as autofunções do Hamiltoniano não-perturbado, $H_0 |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle$. Para $t < t_0$ o sistema se encontra em equilíbrio com um reservatório a temperatura constante T . Então a probabilidade de encontrarmos o sistema em cada auto-estado de H_0 é a priori conhecida. Após a perturbação ser ligada - pela hipótese de que o processo seja adiabático - a perturbação é pequena e age de forma gradual fazendo com que o tempo para o sistema entrar em equilíbrio novamente com o reservatório seja menor que o tempo característico entre as transições para autoestados de H_0 ¹, deixando a probabilidade de ocupação de um auto-estado permanecer constante.

Calculemos então o valor médio de um observável sujeito a uma perturbação dependente do tempo sem que essa perturbação seja capaz de repopular os auto-estados do problema não-perturbado. Para isso vamos trabalhar com os operadores e auto-estados na representação de Interação, ambos agora sendo dependentes do tempo.

De forma geral, nessa representação, um operador O e um estado $n(t)$ são representados da seguinte forma:

$$\hat{O}(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} O e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \quad (3.3)$$

¹O tempo característico da transição de um estado com energia E_m para outro com energia E_n é igual a $\tau_{m,n} = \frac{2\pi\hbar}{|E_m - E_n|}$

e

$$|\hat{n}(t)\rangle = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} |n(t)\rangle. \quad (3.4)$$

A presença ou ausência do acento circunflexo nos operadores indica a representação de Interação e Schrödinger, respectivamente. Derivando a equação (3.4) em relação ao tempo obtemos uma equação diferencial para os auto-estados

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\hat{n}(t)\rangle = \hat{W}(t) |\hat{n}(t)\rangle, \quad (3.5)$$

o que nos dá a equação para o operador evolução temporal

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{W}(t) \hat{U}(t, t_0). \quad (3.6)$$

Resolvendo a equação (3.6) ficamos com

$$\hat{U}(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t') \hat{U}(t', t_0). \quad (3.7)$$

Note que se substituirmos $U(t, t_0)$ dentro da integral na equação (3.7), ficamos com outra equação dependente do operador evolução temporal. Substituindo novamente e assim sucessivamente ficamos com o operador evolução temporal escrito em termos da perturbação. Cada termo da expansão traz uma ordem mais alta de $W(t)$ em relação ao termo anterior. Para uma perturbação fraca fazemos uma aproximação de ordem zero para o operador $\hat{U}(t)$ dentro da integral da equação (3.7) deixando-a dependendo da perturbação em ordem linear,

$$\hat{U}(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}(t'). \quad (3.8)$$

O valor esperado de um observável calculado na representação de Interação ou de Schrödinger ou de Heisenberg leva ao mesmo resultado. Efetuando uma média sobre todas as configurações possíveis de um sistema em equilíbrio térmico (média térmica)²,

²O resultado para essa média térmica independe se o ensemble usando é o canônico ou o gran-canônico.

temos

$$\langle A_\alpha \rangle(t) = \sum_n P_n \langle n(t) | A_\alpha | n(t) \rangle. \quad (3.9)$$

Onde P_n é probabilidade de ocorrência da configuração descrita pelo autoestado denotado por n .

Na equação (3.9) já desconsideramos o termo de segunda ordem para a perturbação, para sermos consistentes. As direções cartesianas são indicadas pela letra α . Combinando as equações (3.3), (3.4), (3.8) e (3.9) ficamos com a média térmica do observável A perturbado separado na soma de um termo que corresponde a média térmica de A sem a ação da perturbação e mais um termo de correção que surge devido ao campo perturbativo

$$\langle A_\alpha \rangle(t) = \langle A_\alpha \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left\langle \left[\hat{A}_\alpha(t), \hat{W}_\beta(t') \right] \right\rangle_0. \quad (3.10)$$

Denotando $\sum_n P_n \langle n | O | n \rangle = \langle O \rangle_0$ e tomando o limite $t_0 \rightarrow -\infty$, substituindo $\tau = t - t'$ e utilizando $\hat{W}(t') = \hat{B}F(t')\Theta(0)$, a equação (3.10) pode ser escrita como

$$\langle A_\alpha \rangle(t)_\delta = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \Theta(\tau) \left\langle \left[\hat{A}_\alpha(\tau), B_\beta \right] \right\rangle_0 F_\beta(t - \tau). \quad (3.11)$$

Onde definimos a variação do observável $A(t)$ devido a perturbação $\langle A \rangle(t)_\delta = \langle A \rangle(t) - \langle A \rangle_0$. A equação (3.11) assume a forma de uma convolução no espaço de tempo se identificarmos a função resposta $\chi_{\alpha\beta}(\tau)$ como em (3.12)

$$\chi_{\alpha\beta}(\tau) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) \left\langle \left[\hat{A}_\alpha(\tau), B_\beta \right] \right\rangle_0, \quad (3.12)$$

o que gera uma relação linear no espaço das frequências. A média térmica do comutador $\left\langle \left[\hat{A}(\tau), B \right] \right\rangle_0$ é denominada função de correlação dos operadores A e B . Assim, o valor do observável $A(t)$ medido no instante t depende de contribuições do campo perturbativo nos instantes t' anteriores a medida, com a função resposta $\chi(\tau)$ sendo o peso dessa contribuição. A função resposta se relaciona aos operadores em diferentes instantes de tempo por meio do acoplamento do observável A no instante t e do B relacionado à perturbação no instante $t - \tau = t'$. Note que a função Heaviside $\Theta(\tau)$, presente na

definição da função resposta, indica que a perturbação só tem efeito sobre o valor de $A(t)$ em instantes anteriores à medida. Por esse motivo, a função resposta é denominada causal ou retardada³.

Explicitando a convolução

$$\langle A_\alpha \rangle(t)_\delta = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \chi(\tau) F_\beta(t - \tau), \quad (3.13)$$

a transformada de Fourier de uma convolução é o produto das transformadas de cada termo. Como esperado isso leva a uma dependência linear entre o observável A e o termo perturbativo,

$$\langle A_\alpha \rangle(\omega)_\delta = \chi_{\alpha\beta}(\omega) F_\beta(\omega). \quad (3.14)$$

Finalmente obtemos a função resposta $\chi_{\alpha\beta}(\omega)$ dependente da frequência como sendo a transformada de Fourier de (3.12),

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{i}{\hbar} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} d\tau \left\langle \left[\hat{A}_\alpha(\tau), B_\beta \right] \right\rangle_0 e^{(\omega + i\eta)\tau}. \quad (3.15)$$

As equações para cada função resposta são denominadas fórmulas de Kubo(40). O termo de relação $e^{-\eta\tau}$ é introduzido para que a integral venha a convergir. Assim após esse cálculo vamos tomar o limite $\eta \rightarrow 0^+$. Note que as funções respostas são propriedades do sistema não-perturbado, portanto, o conhecimento das autofunções e autovalores do Hamiltoniano H_0 e os elementos de matriz dos operadores envolvidos determinam o problema por completo.

3.2.1 Função resposta na aproximação de material homogêneo:

$$\chi(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$$

Em nenhum momento consideramos a dependência espacial dos operadores. Para um material não-homogêneo a função resposta leva em conta essa dependência de forma

³Esta função resposta está relacionada a função de Green retardada.

separada ficando $\chi(\vec{r}, \vec{r}', t - t')$. Aqui consideramos o caso mais simples em que o material é homogêneo. Neste caso a função resposta depende somente do espaçamento relativo de onde é aplicado o campo externo e a posição do medidor de $\langle A \rangle$, ou seja, a função resposta é uma função de $\vec{r} - \vec{r}'$. No caso de um campo elétrico como perturbação essa hipótese é violada pois elétrons também sentem o potencial da rede. Fazendo-se uma média sobre todo o volume do material recuperamos a hipótese de homogeneidade do sistema. Com o objetivo de encontrarmos uma convolução no espaço real e acharmos uma relação linear entre observável e campo perturbativo em analogia com o que fizemos para o tempo. Assim, o termo perturbativo assume a seguinte forma

$$\hat{W}(t) = \sum_i \hat{B}_i(t) F(\vec{r}_i, t) = \int d\vec{r} \hat{B}_i(t) n(\vec{r}) F(\vec{r}, t). \quad (3.16)$$

Onde identificamos $n(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$ como o operador densidade de partículas e introduzimos o operador $\hat{C}(\vec{r}, t) = \hat{B}_i(t) n(\vec{r})$ por economia de notação. Assim, repetindo a passagem de (3.10) para (3.11) com a perturbação (3.16) e fazendo a mudança de variáveis $\vec{R} = \vec{r}' - \vec{r}$ ficamos com

$$\langle A_\alpha \rangle(t)_\delta = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \int_V d\vec{R} \Theta(\tau) \left\langle \left[\hat{A}_\alpha(\vec{r}, \tau), C_\beta(\vec{r}') \right] \right\rangle_0 F_\beta(\vec{r} - \vec{R}, t - \tau), \quad (3.17)$$

com o volume do sistema V sendo todo o espaço. Supondo que a função resposta dependa apenas de $\vec{r} - \vec{r}'$, ou seja, $\chi(\vec{r}' - \vec{r}, t' - t)$, podemos fazer a transformada de Fourier da convolução como em (3.13) recuperando a dependência linear em $\vec{q}$, onde $\vec{q}$ é a variável recíproca de $\vec{r}$,

$$\langle A_\alpha \rangle(\vec{q}, \omega)_\delta = \chi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) F_\beta(\vec{q}, \omega). \quad (3.18)$$

Comparando com a forma geral que relaciona o valor médio do observável $A(\vec{r}, t)$ com o campo perturbativo $F(\vec{r} - \vec{R}, t - \tau)$ dada pela (3.1), ficamos com a função resposta

$$\chi_{\alpha\beta}(q, \omega) = -\frac{i}{\hbar V} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} d\tau \left\langle \left[\hat{A}_\alpha(-\vec{q}, \tau), B_\beta(\vec{q}) \right] \right\rangle_0 e^{(\omega + i\eta)\tau}. \quad (3.19)$$

Note que usamos a função delta na forma integral para fazermos a transformada de Fourier no operador $B(\vec{r})$ e fizemos uma média em todo o volume para efetuar a mesma transformação sobre $A(\vec{r}, \tau)$.

O próximo tópico trata de como adequar a equação (3.19) para a descrição de um sistema de muitos elétrons independentes.

3.2.2 Função resposta para elétrons independentes

Vamos usar o procedimento denominado segunda quantização para escrevermos a função resposta (3.19) em termos de elementos de matriz de operadores de uma partícula. Lembramos que a equação (3.19) está escrita em termos de operadores A e B de muitos corpos. Assim, a função de onda responsável pela média escrita explicitamente é o determinante de Slater com $N \times N$ elementos, onde N é o número total de partículas no sistema. Podemos simplificar nosso tratamento reescrevendo os operadores em linguagem de segunda quantização não trabalhando mais com somatórios sobre cada partícula e sim, sobre cada estado. Um operador O de uma partícula é escrito em termos dos operadores de criação $a^\dagger$ e destruição a da seguinte forma

$$\hat{O}(t) = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | O | \beta \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta, \quad (3.20)$$

onde $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são os estados de única partícula do Hamiltoniano (3.2) e os operadores de criação e destruição obedecem à relação de anti-comutação $\{a_\alpha^\dagger, a_\beta\} = a_\alpha^\dagger a_\beta + a_\beta a_\alpha^\dagger = \delta_{\alpha\beta}$. Tomando o limite de campo elétrico espacialmente homogêneo ($q \rightarrow 0$) e escrevendo os operadores como em (3.20), a função resposta fica

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{i}{\hbar V} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} d\tau \sum_{\alpha\beta} \sum_{\gamma\delta} A_{\alpha\beta} B_{\gamma\delta} e^{(\omega+i\eta)\tau} \langle [a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}, a_{\gamma}^{\dagger} a_{\delta}] \rangle_0 e^{i\omega_{\alpha\beta}\tau}, \quad (3.21)$$

com $\omega_{\alpha\beta} = \omega_{\alpha} - \omega_{\beta}$ e $|\gamma\rangle$ e $|\delta\rangle$ também denotam os estados do Hamiltoniano (3.2). Usamos $\langle \alpha | O | \beta \rangle \equiv O_{\alpha\beta}$. Usando a relação de anti-comutação para os operadores criação e destruição e manipulando o comutador conseguimos escrever

$$[a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}, a_{\gamma}^{\dagger} a_{\delta}] = \delta_{\beta\gamma} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\delta} - \delta_{\alpha\delta} a_{\gamma}^{\dagger} a_{\beta}. \quad (3.22)$$

Sendo ϵ_F a energia de Fermi. Nosso cálculo é feito a temperatura zero, assim temos que o primeiro termo $\delta_{\beta\gamma} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\delta}$ deve satisfazer $\alpha < \epsilon_F$ (estados com energia acima de ϵ_F) e o segundo $\delta_{\alpha\delta} a_{\gamma}^{\dagger} a_{\beta}$ tem $\beta < \epsilon_F$ (estados com energia abaixo de ϵ_F), pois a atuação do operador destruição no mar de Fermi só pode ocorrer se essas duas condições forem satisfeitas. Tomando a média térmica da (3.22) obtemos

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{i}{\hbar V} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} d\tau e^{(\omega+i\eta)\tau} \left\{ \sum_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} B_{\beta\alpha} e^{i\omega_{\alpha\beta}\tau} f_{\alpha} - \sum_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} B_{\beta\alpha} e^{i\omega_{\alpha\beta}\tau} f_{\beta} \right\}, \quad (3.23)$$

onde

$$f_{\alpha} = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{\alpha} - \epsilon_F}{k_b T}} + 1}. \quad (3.24)$$

onde k_b é a constante de Boltzmann. Como já apontado, nosso cálculo é feito a temperatura zero, e portanto sabemos exatamente a distribuição dos elétrons nos estados permitidos. Isso devido ao fato que a função distribuição de Fermi-Dirac (3.24) assume a forma de uma função escada sendo igual a unidade para energias menores que a energia de Fermi e nula para energias maiores. Explicitamente, $\langle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} \rangle_0 = \delta_{\alpha\beta} f_{\alpha}$. Fazendo a substituição de variáveis $\alpha \rightarrow \beta$ e $\beta \rightarrow \alpha$ na segunda parte da equação (3.23) e resolvendo a integral em τ temos

⁴ $\int_0^{+\infty} d\tau e^{(\theta+i\eta)\tau} = \frac{i}{\theta+i\eta}$. No cálculo dessa integral abrimos as exponenciais complexas em funções trigonométricas e integramos por partes o termo real e o termo complexo.

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{\hbar V} \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{\alpha}^{<\epsilon_F} \sum_{\beta}^{>\epsilon_F} \left\{ \frac{A_{\alpha\beta} B_{\beta\alpha}}{\omega + \omega_{\alpha\beta} + i\eta} - \frac{A_{\beta\alpha} B_{\alpha\beta}}{\omega + \omega_{\beta\alpha} + i\eta} \right\}. \quad (3.25)$$

Essa forma de escrevermos a função resposta $\chi_{\alpha\beta}$ é denominada representação de Lehmann. Note que dessa forma alteramos os limites do somatório ficando $\alpha < \epsilon_F$ e $\beta > \epsilon_F$, indicando estados abaixo e acima do nível de Fermi, respectivamente. Tomando a parte real da equação (3.25) e fazendo o limite de $\eta \rightarrow 0$ (pois já resolvemos a integral na equação (3.21)), temos

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{\hbar V} \sum_{\alpha}^{<\epsilon_F} \sum_{\beta}^{>\epsilon_F} \frac{2i\omega}{\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2} \Im(A_{\beta\alpha} B_{\alpha\beta}), \quad (3.26)$$

onde o símbolo $\Im(x)$ denota a parte imaginária de x . No caso especial da simetria dos elementos de matriz $A_{\alpha\beta}^\dagger = A_{\alpha\beta}$ e $B_{\alpha\beta} \rightarrow \frac{i}{\omega} B_{\alpha\beta}$ ⁵ com $B_{\alpha\beta}^\dagger = -B_{\alpha\beta}$, válido, como veremos, no nosso problema (seção 3.3), a equação se reduz a

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{\hbar V} \sum_{\alpha}^{<\epsilon_F} \sum_{\beta}^{>\epsilon_F} \frac{2i}{\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2} A_{\beta\alpha} B_{\alpha\beta}. \quad (3.27)$$

O termos α e β identificam os auto-estados do Hamiltoniano (3.28).

O desenvolvimento teórico aqui apresentado em linhas gerais é denominado Formalismo de Kubo(40). Na próxima seção aplicaremos este formalismo à correntes de spin. Calcularemos a condutividade Hall de spin σ_{xy}^z para sistemas com acoplamento spin-órbita intersubbanda(36), ou seja, gases de elétrons formados em poços quânticos com duas subbandas.

⁵Essa transformação é introduzida para levar a uma identificação direta do operador B com o operador densidade de corrente carga na seção 3.3. Assim como identificaremos diretamente o operador A com o operador densidade de corrente de spin.

3.3 Cálculo da condutividade Hall de spin na presença do Hamiltoniano spin-órbita inter-subbanda

Vamos aplicar o formalismo desenvolvido na seção 3.2 no cálculo da condutividade Hall de spin σ_{xy}^z . Usaremos o método de Rashba (33), que consiste em aplicar um campo magnético $\vec{B}$ no sistema e depois tomar o limite $\vec{B} \rightarrow 0$, para resolver o problema. Assim inicialmente aplicaremos o campo magnético $\vec{B}$ ao problema e depois tomaremos o limite $\vec{B} \rightarrow 0$ no final dos cálculos. Como mostrado por Rashba (33), este procedimento torna explícito todas as contribuições relevantes para a condutividade Hall de spin.

Relacionamos o valor médio para a densidade de corrente de spin e o campo elétrico de forma linear $J_x^z(\omega) = \sigma_{xy}^z(\omega)E_y(\omega)$ (Eq. (1.3)). Assim, comparando a expressão (1.2) com (3.18) identificamos a função resposta $\chi_{\alpha\beta}$ como a condutividade Hall de spin σ_{xy}^z , o campo perturbativo F_β como o campo elétrico E_y e o observável A_α como o operador densidade de corrente de spin J_x^z . Agora precisamos identificar os termos restantes da expressão final para a σ_{xy}^z (3.27). Estes termos são os autoestados (α e β em (3.27)) do problema não-perturbado pelo campo elétrico e o operador B . O Hamiltoniano do nosso sistema é uma soma de Hamiltonianos (2.16), ou seja,

$$H = \sum_i \left[\left(\frac{\vec{\Pi}_i^2}{2m^*} + \bar{\epsilon} \right) 1 \otimes 1 - \frac{\Delta\epsilon}{2} \tau_z \otimes 1 + \frac{\eta}{\hbar} \tau_x \otimes (\Pi_{ix}\sigma_y - \Pi_{iy}\sigma_x) \right]. \quad (3.28)$$

Note que o Hamiltoniano (3.28) contém um campo magnético (substituição $\vec{p} \rightarrow \vec{\Pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$). Abrindo a expressão (3.28) identificamos H_0 como a expressão equivalente a (3.28) que sabemos resolver exatamente (ver seção 2.5). O termo restante é identificado como o termo perturbativo

$$W(t) = \sum_i \left[-\frac{e}{2m^*c} \left(\vec{A}(\vec{r}_i, t) \vec{p}_i + \vec{p}_i \vec{A}(\vec{r}_i, t) \right) - \frac{e\eta}{c\hbar} (A_x(\vec{r}_i, t)\sigma_y - A_y(\vec{r}_i, t)\sigma_x) \right]. \quad (3.29)$$

Vamos reescrever o termo perturbativo (3.29) numa forma mais compacta em termos do operador densidade de corrente de carga

$$j_\beta(\vec{r}) = \frac{e}{2} \sum_i (v_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) + \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) v_i)_\beta. \quad (3.30)$$

Usando $A(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \delta(\vec{r} - \vec{r}') A(\vec{r}', t)$, a expressão (3.29) fica

$$W(t) = \frac{i}{\omega} \int d\vec{r} \vec{j}(\vec{r}) \cdot \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (3.31)$$

onde consideramos o potencial elétrico nulo e relacionamos o potencial vetor com o campo elétrico fazendo $-\frac{1}{c}\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{i}{\omega}\vec{E}(\vec{r}, t)$. Como fizemos na equação (3.2), a perturbação $W(t)$ pode ser escrita como $W(t) = \vec{B} \cdot \vec{F}(t)$. Como $\vec{F}(t)$ é o campo elétrico $\vec{E}(\vec{r}, t)$, o termo restante da equação (3.31) identifica o operador $\frac{i}{\omega}\vec{B} = \frac{i}{\omega} \int d\vec{r} \vec{j}(\vec{r})$. No entanto, para obtermos a expressão (3.27) usamos a integral em $\vec{j}(\vec{r})$ para fazer a transformada de Fourier sobre esse operador. Finalmente, o operador $\vec{B}$ é identificado como $\vec{j}(\vec{q})$.

Identificamos assim $A = J_x^z$ e no limite de campo elétrico homogêneo na direção y , temos $B = j_y$. Assim podemos escrever a expressão (3.27) para o cálculo de σ_{xy}^z . Ainda relacionando J_x^z definida pela equação (1.3) com j_x^z da seguinte maneira $J_x^z = \frac{\hbar}{2} j_x^{z6}$ temos

$$\sigma_{xy}^z(\omega) = \frac{ie}{V} \sum_{\lambda k n \mu}^{<\epsilon_F} \sum_{\lambda' k' n' \mu'}^{>\epsilon_F} \frac{\langle \lambda k n \mu | j_x^z | \lambda' k' n' \mu' \rangle \langle \lambda' k' n' \mu' | v_y | \lambda k n \mu \rangle}{\omega^2 - \omega_{\lambda k n \mu, \lambda' k' n' \mu'}^2}, \quad (3.32)$$

com o operador densidade de corrente de carga $j_{yi} = e v_{yi}$. Como já dito, α e β identificam os auto-estados do Hamiltoniano (3.28) de partícula independente denotados aqui por $|\lambda k n \mu\rangle$ e $|\lambda' k' n' \mu'\rangle$, respectivamente. A seguir, simplificaremos a equação (3.32). O índice λ denota o subespaço, k nomeia o vetor de onda, n denota níveis de Landau e μ indica o ramo do espectro. A primeira simplificação pode ser feita usando propriedades

⁶O operador densidade de corrente J_x^z usado em nossos cálculos é o mesmo da referência (16), mas Rashba em (33) usa j_x^z .

dos elementos de matriz. Todos esses elementos (calculados no apêndice A) da equação (3.32) resultam em $\delta_{\lambda,\lambda'}$ e $\delta_{k,k'}$, em relação aos números quânticos λ e k . Seleccionando assim, o subespaço e o vetor de onda, respectivamente, limitando o somatório em (3.32). Como as funções de onda e consequentemente os elementos de matriz não dependem do operador k , podemos realizar o somatório $\sum_k$ que resulta na degenerescência dos níveis de Landau. Esta degenerescência é $g = \frac{1}{2\pi l_b^2}$ por unidade de área. Tomando o limite de corrente contínua $\lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma_{xy}^z(\omega) = \sigma_{xy}^z$ chegamos em

$$\sigma_{xy}^z = -\frac{ie}{2\pi l_b^2} \sum_{\lambda} \sum_{n\mu}^{\leq \epsilon_F} \sum_{n'\mu'}^{> \epsilon_F} \frac{\langle \lambda n\mu | j_x^z | \lambda n'\mu' \rangle \langle \lambda n'\mu' | v_y | \lambda n\mu \rangle}{(\omega_{\lambda n\mu} - \omega_{\lambda n'\mu'})^2}. \quad (3.33)$$

A subseção seguinte simplifica a equação (3.33) usando equações de movimento para o operador v_y e calculando o operador j_x^z para o Hamiltoniano spin-órbita inter-subbanda.

3.3.1 Simplificações na expressão (3.33) para a condutividade Hall de spin

Vamos fazer algumas simplificações na equação (3.33) deixando-a em termos de elementos de matrizes calculados no apêndice A. Então escrevemos a equação de movimento para o operador y e relacionando-o dessa maneira com o operador v_y , a fim de simplificar o denominador da expressão (3.33). Antes de escrevermos a equação de movimento para $v_y = \frac{i}{\hbar} [H, y]$ podemos relacionar o operador y com os operadores criação $a^\dagger$ e destruição a , pois sabemos como eles atuam na base $|n\mu\rangle$. Para tanto, substituímos o calibre de Landau na equação (2.23),

$$y = k_x l_b^2 - l_b^2 \frac{p_x}{\hbar}, \quad (3.34)$$

onde definimos

$$k_x = \frac{a^\dagger + a}{\sqrt{2}l_b}. \quad (3.35)$$

Usando (3.34) e que $[H, P_x] = 0$, segue que,

$$\begin{aligned}\langle \lambda n' \mu' | v_y | \lambda n \mu \rangle &= \frac{i}{\hbar} [H, y] \\ &= i (\omega_{\lambda n' \mu'} - \omega_{\lambda n \mu}) \langle \lambda n' \mu' | v_y | \lambda n \mu \rangle \\ &= i l_b^2 (\omega_{\lambda n \mu} - \omega_{\lambda n' \mu'}) \langle \lambda n' \mu' | k_x | \lambda n \mu \rangle.\end{aligned}\quad (3.36)$$

Agora vamos reescrever o elemento de matriz do operador $j_x^z = \frac{1}{2} (v_x \sigma_z + \sigma_z v_x)$. Calculamos o operador velocidade para o Hamiltoniano spin-órbita intersubbanda (3.28). Usando equação de Heisenberg $v_x = \frac{i}{\hbar} [H, x]$ obtemos

$$v_x = \frac{\Pi \otimes 1}{m} + \frac{\eta}{\hbar} \tau_x \otimes \sigma_y, \quad (3.37)$$

onde o símbolo $\otimes$ denota o produto direto. Substituindo o resultado para o operador velocidade v_x em j_x^z ficamos com

$$j_x^z = \frac{\Pi}{m} 1 \otimes \sigma_z. \quad (3.38)$$

Relacionando j_x^z com a equação de movimento $\frac{d\tau_x \otimes \sigma_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \tau_x \otimes \sigma_x]$ obtemos

$$\frac{d\tau_x \otimes \sigma_x}{dt} = \frac{\Delta\epsilon}{\hbar} \tau_y \otimes \sigma_x + \frac{2\eta\Pi_x}{\hbar^2} 1 \otimes \sigma_z, \quad (3.39)$$

onde usamos os comutadores $[\tau_z \otimes 1, \tau_x \otimes \sigma_x] = 2i\tau_y \otimes \sigma_x$ e $[\tau_x \otimes \sigma_y, \tau_x \otimes \sigma_x] = -2i1 \otimes \sigma_z$.

Combinando (3.38) com (3.39) temos

$$j_x^z = \frac{\hbar^2}{2m\eta} \left(\frac{d\tau_x \otimes \sigma_x}{dt} - \frac{\Delta\epsilon}{\hbar} \tau_y \otimes \sigma_x \right). \quad (3.40)$$

Identificamos dois termos na equação (3.40), $j_x^z = j_x^{z(1)} + j_x^{z(2)}$, onde $j_x^{z(1)} = \frac{\hbar^2}{2m\eta} \left(\frac{d\tau_x \otimes \sigma_x}{dt} \right)$ e $j_x^{z(2)} = -\frac{\hbar^2}{2m\eta} \left(\frac{\Delta\epsilon}{\hbar} \tau_y \otimes \sigma_x \right)$. Esses dois termos permitem que escrevamos a condutividade Hall de spin (3.33) também separada em dois termos $\sigma_{xy}^z = \sigma_{xy}^{z(1)} + \sigma_{xy}^{z(2)}$. Cada termo de σ_{xy}^z é colocado abaixo:

$$\frac{\sigma_{xy}^{z(1)}}{\sigma_0} = \sum_{\lambda} \sum_{n\mu}^{<\epsilon_F} \sum_{n'\mu'}^{>\epsilon_F} \frac{2\hbar^2}{i\eta m} \langle \lambda n \mu | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n' \mu' \rangle \langle \lambda n' \mu' | k_x | \lambda n \mu \rangle \quad (3.41)$$

e

$$\frac{\sigma_{xy}^{z(2)}}{\sigma_0} = \sum_{\lambda} \sum_{n\mu}^{<\epsilon_F} \sum_{n'\mu'}^{>\epsilon_F} \frac{2\hbar\Delta\epsilon}{\eta m} \frac{\langle \lambda n \mu | \tau_y \otimes \sigma_x | \lambda n' \mu' \rangle \langle \lambda n' \mu' | k_x | \lambda n \mu \rangle}{\omega_{\lambda n \mu} - \omega_{\lambda n' \mu'}}. \quad (3.42)$$

Abaixo descrevemos como é feita a divisão para o cálculo de $\sigma_{xy}^z = \sigma_{xy}^{z(1)} + \sigma_{xy}^{z(2)}$ em relação ao posicionamento da energia de Fermi e somatórios com $\mu \equiv \mu'$ (intra-ramo) e $\mu \neq \mu'$ (inter-ramo) .

3.3.2 Procedimento para o cálculo de σ_{xy}^z

Calcularemos $\sigma_{xy}^{z(1)}$ e $\sigma_{xy}^{z(2)}$ para duas situações dependendo da posição da energia de Fermi em relação as duas primeiras subbandas. Nas simulações, essas condições serão controladas pela densidade de elétrons confinados no poço quântico. Ainda para cada situação do posicionamento do nível de Fermi, separamos as contribuições da condutividade devido a transições entre diferentes ramos (inter-ramos) do espectro do Hamiltoniano (2.22) e transições no mesmo ramo (intra-ramos). As transições inter-ramos ocorrem somente do ramo $\lambda = +$ para $\lambda = -$ com regra de seleção $|\lambda n + \rangle \rightarrow |\lambda n \pm 1 - \rangle$ e as transições intra-ramos ocorrem nas proximidades desse nível com regra de seleção $|\lambda n_{\lambda\mu} \mu \rangle \rightarrow |\lambda n_{\lambda\mu} \pm 1 \mu \rangle$ (ver figura 3.1). Os elementos de matriz de k_x ⁷ nos dão a regra de seleção dessas transições já que são relacionadas com as correções da função de onda em teoria de perturbação dependente do tempo. Obviamente as transições ocorrem de níveis preenchidos para não preenchidos, fato já incluído nos somatórios da equação (3.33).

Por simplicidade, vamos trabalhar apenas com as somatórios em n e μ das equações (3.41) e (3.42), deixando as constantes para serem simplificadas no final do cálculo. Definimos

⁷Os resultados para esses elementos de matriz se encontram no Apêndice A.

Figura 3.1. Diagrama esquemático descrevendo as transições inter(azul) e intra-ramos(vermelho). n_μ denota o mais alto nível de Landau preenchido nos ramos $\mu = +$ ou $\mu = -$. A figura da esquerda representa o caso $\epsilon_F > \epsilon_o$, e da direita o caso $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$.

$$\frac{\sigma_{xy}^{z(1)}}{\sigma_0} = \frac{2\hbar^2}{i\eta m} \sum_{\lambda} \sigma_{\lambda}^{(1)} \quad (3.43)$$

e,

$$\frac{\sigma_{xy}^{z(2)}}{\sigma_0} = \frac{2\hbar\Delta\epsilon}{\eta m} \sum_{\lambda} \sigma_{\lambda}^{(2)} \quad (3.44)$$

onde nosso parâmetro de comparação para a condutividade é $\sigma_0 = \frac{e}{8\pi}$. E $\sigma_{\lambda}^{(1)}$ e $\sigma_{\lambda}^{(2)}$ receberão um índice inferior *intra* ou *inter* dependendo se o somatório é realizado satisfazendo $\mu \equiv \mu'$ ou $\mu \neq \mu'$, respectivamente.

Assim, nas próximas seções realizaremos os cálculos de $\sigma_{xy}^{z(1)}$ e $\sigma_{xy}^{z(2)}$ para as duas situações para a posição do nível de Fermi: $\epsilon_F > \epsilon_o$ e $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$ separando as contribuições em inter e intra-ramos.

3.3.3 Contribuições para a condutividade devido a $\sigma_{xy}^{z(1)}$

Caso $\epsilon_F > \epsilon_o$

Vamos calcular $\sigma_{\lambda inter}^{(1)}$, presente na equação (3.43), devido somente à transições inter-ramos. Ou seja, com $\mu \neq \mu'$ na somatória da equação (3.41). Esse somatório é limitado também pela condição $\epsilon_F > \epsilon_o$ relativa ao posicionamento do nível de Fermi. Ficamos então com⁸,

$$\begin{aligned} \sigma_{\lambda inter}^{(1)} = \sum_{n_{\lambda-}+1}^{n_{\lambda+}-1} & \langle \lambda n+ | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n+1- \rangle \langle \lambda n+1- | kx | \lambda n+ \rangle + \\ & \langle \lambda n+1+ | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n- \rangle \langle \lambda n- | kx | \lambda n+1+ \rangle. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Explicitando os termos para cada elemento de matriz apresentados no Apêndice A. Fazendo o somatório os termos vão se cancelando restando somente termos relativos aos limites da soma,

$$\begin{aligned} \sigma_{\lambda inter}^{(1)} &= \frac{i}{2\sqrt{2}l_b} \left[\sqrt{n_{\lambda+}} \sin \theta_{\lambda n_{\lambda+}} - \sqrt{n_{\lambda-}+1} \sin \theta_{\lambda n_{\lambda-}+1} \right] \\ &= \frac{e}{8\pi} \sum_{\lambda} \left[\frac{n_{\lambda+}}{\gamma_{\lambda n_{\lambda+}}} - \frac{n_{\lambda-}+1}{\gamma_{\lambda n_{\lambda-}+1}} \right]. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Usamos as funções trigonométricas definidas na seção 2.5. Assim, $\sigma_{inter}^{(1)}$ ⁹ fica,

$$\frac{\sigma_{inter}^{(1)}}{\sigma_0} = \sum_{\lambda} \frac{n_{\lambda+}}{\gamma_{\lambda n_{\lambda+}}} - \frac{n_{\lambda-}+1}{\gamma_{\lambda n_{\lambda-}+1}}. \quad (3.47)$$

Agora calculamos analogamente ao que fizemos para obter (3.47) mas na condição

⁸Por simplicidade, em todos os cálculos para σ_{xy}^z vamos calcular a contribuições das transições inter-ramos (equações (3.45), (3.52), (3.62) e (3.67)) e dois dos termos desse somatório, serão incluídos nas contribuições intra-ramo (equações (3.48), (3.54), (3.64) e (3.69)). Tal mudança não altera nosso resultado para a σ_{xy}^z devido a transições intra-ramos, pois esses termos devido a transições inter-ramos são nulos no limite de $\vec{B} \rightarrow 0$.

⁹Deixamos implícitos os índices para as direções em $\sigma_{xy}^z = \sigma$ para uma notação mais limpa.

$\mu \equiv \mu'$ do somatório da equação (3.41). Ou seja, calculamos (3.43) para a contribuição intra-ramo com $\epsilon_F > \epsilon_o$. Obtemos

$$\begin{aligned} \sigma_{\lambda intra}^{(1)} = & \langle \lambda n_{\lambda+} + | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n_{\lambda+} + 1 - \rangle \langle \lambda n_{\lambda+} + 1 - | k_x | \lambda n_{\lambda+} + \rangle + \\ & \langle \lambda n_{\lambda-} + | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n_{\lambda-} + 1 - \rangle \langle \lambda n_{\lambda-} + 1 - | k_x | \lambda n_{\lambda-} + \rangle + \\ & \langle \lambda n_{\lambda+} + | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n_{\lambda+} + 1 + \rangle \langle \lambda n_{\lambda+} + 1 + | k_x | \lambda n_{\lambda+} + \rangle + \\ & \langle \lambda n_{\lambda-} + | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n_{\lambda-} + 1 - \rangle \langle \lambda n_{\lambda-} + 1 - | k_x | \lambda n_{\lambda-} - \rangle, \end{aligned} \quad (3.48)$$

usando as expressões trigonométricas da seção 2.5 temos

$$\begin{aligned} \sigma_{\lambda intra}^{(1)} = & \frac{i}{2\sqrt{2}l_b} \left[\sqrt{n_{\lambda-} + 1} \sin \theta_{\lambda n_{\lambda-} + 1} - \sqrt{n_{\lambda+}} \sin \theta_{\lambda n_{\lambda+}} \right] \\ = & \frac{e}{8\pi} \sum_{\lambda} \left[\frac{n_{\lambda-} + 1}{\gamma_{\lambda n_{\lambda-} + 1}} - \frac{n_{\lambda+}}{\gamma_{\lambda n_{\lambda+}}} \right]. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Note que a equação (3.49) leva ao mesmo resultado da (3.47) a menos de um sinal negativo. Tomando o limite de campo magnético indo a zero¹⁰, a expressão para a condutividade fica

$$\frac{\sigma_{inter}^{(1)}}{\sigma_0} = -\frac{\sigma_{intra}^{(1)}}{\sigma_0} = \frac{2\kappa_1\kappa_2 + 1}{\kappa_1\kappa_2 + 1/4}, \quad (3.50)$$

onde definimos $\kappa_1 = \frac{\epsilon_{SO}}{\epsilon_g}$, $\kappa_2 = \frac{(\epsilon_F - \bar{\epsilon})}{\Delta\epsilon}$, com ϵ_{SO} , ϵ_g , $\bar{\epsilon}$ e $\Delta\epsilon$ definidos na seção 2.5.

Somando as contribuições inter e intra-ramos da equação (3.50) para a (3.41) temos como resultado

$$\sigma_{xy}^{z(1)} = 0. \quad (3.51)$$

Logo o termo $\sigma_{xy}^{z(1)}$ com energia de Fermi $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$ é nula. O mesmo cálculo é feito a seguir na situação de subbandas parcialmente preenchidas $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$ usando a equação

¹⁰O apêndice B traz passagens detalhadas sobre o limite para campo magnético nulo

(3.41).

Caso $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$

Aqui seguimos o mesmo procedimento usado no cálculo de (3.51), mas com a energia de Fermi situada entre as subbandas: $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$. Calculamos então a condutividade Hall de spin pela equação (3.41) devido às contribuições inter-ramos. Ficamos com

$$\sigma_{\lambda inter}^{(1)} = \sum_0^{n_{\lambda+}-1} \langle \lambda n+ | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n+1- \rangle \langle \lambda n+1- | k_x | \lambda n+ \rangle + \langle \lambda n+1+ | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n- \rangle \langle \lambda n- | k_x | \lambda n+1+ \rangle, \quad (3.52)$$

que assume a seguinte forma simplificada

$$\frac{\sigma_{inter}^{(1)}}{\sigma_0} = \sum_{\lambda} \frac{n_{\lambda+}}{\gamma_{n_{\lambda+}}} \quad (3.53)$$

O mesmo procedimento descrito acima é usado no cálculo da contribuição devido à transições intra-ramos $\mu \equiv \mu'$. Assim temos

$$\sigma_{\lambda intra}^{(1)} = \langle \lambda n_{\lambda+}+ | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n_{\lambda+}+1- \rangle \langle \lambda n_{\lambda+}+1- | k_x | \lambda n_{\lambda+}+ \rangle + \langle \lambda n_{\lambda+}+ | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n_{\lambda+}+1+ \rangle \langle \lambda n_{\lambda+}+1+ | k_x | \lambda n_{\lambda+}+ \rangle. \quad (3.54)$$

Explicitando os elementos de matriz e simplificando as expressões resultantes temos

$$\frac{\sigma_{intra}^{(1)}}{\sigma_0} = - \sum_{\lambda} \frac{n_{\lambda+}}{\gamma_{n_{\lambda+}}}. \quad (3.55)$$

Tomando o limite $\vec{B} \rightarrow 0$ obtemos

$$\frac{\sigma_{inter}^{(1)}}{\sigma_0} = - \frac{\sigma_{intra}^{(1)}}{\sigma_0} = 2 + \frac{2\kappa_2}{\kappa_3 + \kappa_1/2}. \quad (3.56)$$

onde $\kappa_3 = \sqrt{\kappa_1^2 + \kappa_1\kappa_2 + \frac{1}{4}}$.

O resultado acima leva a um cancelamento das contribuições inter e intra-ramos anulando novamente a condutividade Hall de spin

$$\sigma_{xy}^{z(1)} = 0, \quad (3.57)$$

como no caso $\epsilon_F > \epsilon_o$. Esse resultado possui uma analogia direta com os cancelamentos de σ_{xy}^z que ocorrem no caso $\epsilon_F > \epsilon_o$ para o modelo de Rashba (33).

Portanto, a contribuição para a condutividade total na situação $\epsilon_F > \epsilon_o$ e para $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$ é nula para o termo $\sigma_{xy}^{z(1)}$. Podemos estender nosso resultado para uma condutividade Hall de spin nula devido ao termo $\sigma_{xy}^{z(1)}$ independente do valor de campo magnético e do valor da energia de Fermi. Para isso, usaremos regras de soma para os elementos de matriz envolvidos na equação (3.41). Assim, partimos do comutador $[\tau_x \otimes \sigma_x, k_x] = 0$, o que resulta em

$$\langle \lambda n \mu | [\tau_x \otimes \sigma_x, k_x] | \lambda n \mu \rangle = \langle \lambda n \mu | \tau_x \otimes \sigma_x k_x | \lambda n \mu \rangle - \langle \lambda n \mu | k_x \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n \mu \rangle = 0. \quad (3.58)$$

Usando a completeza dos estados do Hamiltoniano (2.22), $\sum_{\lambda n' \mu'} |\lambda n' \mu' \rangle \langle \lambda n' \mu'| = 1$, e usando a simetria dos elementos de matriz mediante à troca dos índices que denotam o conjunto de números quânticos provamos que

$$\sum_{\lambda n' \mu'} = \langle \lambda n \mu | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n' \mu' \rangle \langle \lambda n' \mu' | k_x | \lambda n \mu \rangle = 0. \quad (3.59)$$

Identificamos também uma contribuição nula se somarmos apenas abaixo do nível de Fermi para os dois conjuntos $(\lambda n \mu)$ e $(\lambda n' \mu')$,

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\lambda} \sum_{n\mu} \sum_{n'\mu'}^{<\epsilon_F <\epsilon_F} \langle \lambda n\mu | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n'\mu' \rangle \langle \lambda n'\mu' | k_x | \lambda n\mu \rangle = \\
 & \sum_{\lambda} \sum_{n\mu} \sum_{n'\mu'}^{<\epsilon_F <\epsilon_F} \langle \lambda n'\mu' | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n\mu \rangle \langle \lambda n\mu | k_x | \lambda n'\mu' \rangle = \\
 & - \sum_{\lambda} \sum_{n\mu} \sum_{n'\mu'}^{<\epsilon_F <\epsilon_F} \langle \lambda n\mu | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n'\mu' \rangle \langle \lambda n'\mu' | k_x | \lambda n\mu \rangle = 0.
 \end{aligned} \tag{3.60}$$

O que nos permite escrever,

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\lambda} \sum_{n\mu} \sum_{n'\mu'}^{<\epsilon_F >\epsilon_F} \langle \lambda n\mu | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n'\mu' \rangle \langle \lambda n'\mu' | k_x | \lambda n\mu \rangle = \\
 & \sum_{\lambda} \sum_{n\mu} \sum_{n'\mu'}^{<\epsilon_F} \langle \lambda n\mu | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda n'\mu' \rangle \langle \lambda n'\mu' | k_x | \lambda n\mu \rangle = 0
 \end{aligned} \tag{3.61}$$

Dessa maneira podemos identificar a equação (3.59) em (3.41) e anulá-la para qualquer valor de campo magnético e energia de Fermi generalizando o resultado obtido em (3.51) e (3.57). Este cancelamento em $\sigma_{xy}^{z(1)}$ é análogo ao que ocorre quando consideramos a interação spin-órbita de Rashba(33). Este fato é devido ao operador densidade de corrente de spin para o Hamiltoniano de Rashba (1.4) possuir um termo análogo (proporcional a σ_x) ao primeiro termo (proporcional a $\tau_x \otimes \sigma_x$) do mesmo operador para o Hamiltoniano spin-órbita inter-subbanda. No entanto, o operador densidade de corrente de spin (3.40) em nosso caso possui um termo adicional proporcional a $\tau_y \otimes \sigma_x$ quando comparado com o de Rashba(33). Este termo adicional dá origem a $\sigma_{xy}^{z(2)}$. Calcularemos então $\sigma_{xy}^{z(2)}$ e veremos que na condição $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$ este termo resulta numa contribuição não-nula para a condutividade Hall de spin.

3.3.4 Contribuições para a condutividade devido a $\sigma_{xy}^{z(2)}$

Seguimos com o cálculo de $\sigma_{xy}^{z(2)}$ nas duas situações para a energia de Fermi: $\epsilon_F > \epsilon_o$ e $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$. O procedimento é análogo ao desenvolvido na seção 3.3.3 mas para a

equação (3.42).

Caso $\epsilon_F > \epsilon_o$

A condutividade Hall de spin devido a contribuição inter-ramos fica

$$\frac{\sigma_{inter}^{(2)}}{\sigma_0} = \sum_{\lambda} \lambda \epsilon_g \sum_{n=n_{\lambda-}+1}^{n_{\lambda+}-1} \frac{\frac{n+1+\varsigma_{\lambda}}{\gamma_{\lambda n+1}} - \frac{n-\varsigma_{\lambda}}{\gamma_{\lambda n}}}{(\gamma_{\lambda n+1} + \gamma_{\lambda n})^2 - 1}. \quad (3.62)$$

Explicitando os elementos de matriz e fazendo os cancelamentos necessários e ainda tomando o limite $B \rightarrow 0$ temos

$$\frac{\sigma_{inter}^{(2)}}{\sigma_0} = -\frac{1}{\kappa_1 \kappa_2 + 1/4}. \quad (3.63)$$

Para para a condutividade construída a partir das elementos de matriz de transições intra-ramos, temos

$$\frac{\sigma_{intra}^{(2)}}{\sigma_0} = \sum_{\lambda} \lambda \epsilon_g \left\{ \frac{2n_{\lambda+} + 1 + \frac{n_{\lambda+}-\varsigma_{\lambda}}{\gamma_{\lambda n_{\lambda+}}}}{1 - \epsilon_{SO} + 2\gamma_{\lambda n_{\lambda+}}} - \frac{2n_{\lambda-} + 1 + \frac{n_{\lambda-}+1+\varsigma_{\lambda}}{\gamma_{\lambda n_{\lambda-}+1}}}{1 + \epsilon_{SO} + 2\gamma_{\lambda n_{\lambda-}+1}} \right\}, \quad (3.64)$$

que no limite de campo magnético nulo resulta em

$$\frac{\sigma_{intra}^{(2)}}{\sigma_0} = \frac{1}{\kappa_1 \kappa_2 + 1/4}. \quad (3.65)$$

As duas contribuições inter (3.63) e intra-ramos (3.65) se cancelam. Logo,

$$\sigma_{xy}^{z(2)} = 0. \quad (3.66)$$

Combinando o resultado encontrado para $\sigma_{xy}^{z(2)}$ (3.66) e para $\sigma_{xy}^{z(1)}$ (3.51) temos que a condutividade Hall de spin é nula quando as duas subbandas estão preenchidas: $\epsilon_F > \epsilon_o$. Temos que calcular a condutividade Hall de spin para $\sigma_{xy}^{z(2)}$ quando as subbandas estão parcialmente preenchidas.

Caso $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$

Seguem os termos inter-ramos que contribuem para a condutividade Hall de spin,

$$\frac{\sigma_{inter}^{(2)}}{\sigma_0} = \sum_{\lambda} \lambda \epsilon_g \sum_{n=0}^{n_{\lambda+}-1} \frac{\frac{n+1+\varsigma_{\lambda}}{\gamma_{\lambda n+1}} - \frac{n-\varsigma_{\lambda}}{\gamma_{\lambda n}}}{(\gamma_{\lambda n+1} + \gamma_{\lambda n})^2 - 1}. \quad (3.67)$$

Abrindo os termos da somatória e tomando o limite $B \rightarrow 0$,

$$\frac{\sigma_{inter}^{(2)}}{\sigma_0} = \frac{1}{\kappa_1} \left(\frac{1}{\kappa_3 + \kappa_1/2} - 2 \right). \quad (3.68)$$

Para a contribuição intra-ramos temos

$$\frac{\sigma_{intra}^{(2)}}{\sigma_0} = \sum_{\lambda} \lambda \epsilon_g \left\{ \frac{2n_{\lambda+} + 1 + \frac{n_{\lambda+}-\varsigma_{\lambda}}{\gamma_{\lambda n_{\lambda+}}}}{1 - \epsilon_{SO} + 2\gamma_{\lambda n_{\lambda+}}} \right\}, \quad (3.69)$$

que no limite de campo magnético nulo se reduz à

$$\frac{\sigma_{intra}^{(2)}}{\sigma_0} = \frac{1}{2\kappa_3 (\kappa_3 + \kappa_1/2)} + \frac{\kappa_2 + \kappa_1/2}{2\kappa_3^3}. \quad (3.70)$$

Claramente, as contribuições (3.68) e (3.70) não se cancelam, o que resulta numa condutividade Hall de spin não-nula. O resultado final e a análise do mesmo são desenvolvidos na subseção seguinte.

3.3.5 Resultado final para a condutividade Hall de spin σ_{xy}^z

Temos duas situações interessantes, dependendo da posição da energia de Fermi relativa a duas subbandas, como resultado final para a condutividade de spin σ_{xy}^z . A primeira quando $\epsilon_F > \epsilon_o$, a condutividade se anula

$$\sigma_{xy}^z = \sigma_{xy}^{z(1)} + \sigma_{xy}^{z(2)} = 0. \quad (3.71)$$

No entanto, quando estamos na situação $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$ a condutividade resulta em um valor não-nulo e não-universal, dependendo da intensidade do acoplamento spin-órbita inter-subbanda. Na situação $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$, σ_{xy}^z é dado por

$$\frac{\sigma_{xy}^z}{\sigma_0} = \sigma_{xy}^{z(1)} + \sigma_{xy}^{z(2)} = \frac{1}{\kappa_1} \left(\frac{1}{\kappa_3} - 2 \right) + \frac{\kappa_2 + \kappa_1/2}{2\kappa_3^3}. \quad (3.72)$$

Pelas equações (3.71) e (3.72), note que conforme preenchemos o espectro do Hamiltoniano (3.28), alterando o nível de Fermi, temos uma descontinuidade para a condutividade (3.72) quando $\epsilon_F = \epsilon_o$. Há ainda a competição entre os dois tipos de transições - inter e intra-ramos - que leva a uma mudança de sinal quando a energia de Fermi se localiza entre a primeira e a segunda subbanda, com energias ϵ_e e ϵ_o , respectivamente. Esta descontinuidade e mudança de sinal pode ser relevante experimentalmente. A descontinuidade quando $\epsilon_F = \epsilon_o$ pode ser mensurada pela diferença do valor da condutividade Hall de spin na região $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$ e $\epsilon_F > \epsilon_o$ calculada no ponto da descontinuidade, isto é,

$$\frac{\sigma_{\epsilon_F \rightarrow \epsilon_o^+}}{\sigma_0} - \frac{\sigma_{\epsilon_F \rightarrow \epsilon_o^-}}{\sigma_0} = \frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = \frac{2\kappa_1}{(\kappa_1 + 1)^2}. \quad (3.73)$$

Essa descontinuidade está relacionada a mudança na densidade de estados

$$\rho_{\pm} = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \left(1 \mp \frac{\kappa_1}{2\kappa_3} \right). \quad (3.74)$$

quando o nível de Fermi passa da situação $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$ para a $\epsilon_F > \epsilon_o$. Na primeira situação temos $\rho_- = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \left(1 + \frac{2\epsilon'_{SO}}{\epsilon_-} \right)$ e na segunda $\rho_- + \rho_+ = \frac{m^*}{\pi\hbar^2}$. Calculando a mudança da descontinuidade quando $\epsilon_F = \epsilon_o$, temos

$$\frac{\rho_{\epsilon_F \rightarrow \epsilon_o^+}}{\rho_0} - \frac{\rho_{\epsilon_F \rightarrow \epsilon_o^-}}{\rho_0} = \frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\kappa_1}{\kappa_1 + 1} \right) \quad (3.75)$$

onde $\rho_0 = \frac{m}{\pi\hbar^2}$. Podemos então relacionar a mudança na densidade de estados ρ e a mudança no valor da condutividade Hall de spin σ_{xy}^z na descontinuidade $\epsilon_F = \epsilon_o$. Obtemos,

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = \frac{2 \left(\frac{1}{2\frac{\Delta\rho}{\rho_0}} - 1 \right)}{\left[\left(\frac{1}{2\frac{\Delta\rho}{\rho_0}} - 1 \right) + 1 \right]^2} \quad (3.76)$$

Note que no limite no qual não há mudança na densidade de estados $\left(\lim_{\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \rightarrow 0} \right)$ na relação (3.76), a descontinuidade na condutividade Hall de spin se anula.

A condutividade Hall de spin (3.72) depende dos parâmetros κ_1 e κ_2 , os quais são funções da constante de acoplamento spin-órbita inter-subbanda η e da energia de Fermi, energias da primeira e segunda subbandas, respectivamente. Esperamos que as simulações em poços quânticos para as grandezas envolvidas nos levem a resultados consideráveis o suficiente para que haja possibilidades de observação experimental. Ilustramos o resultado obtido para um valor de $\kappa_2 = 0,2$ que resulta no gráfico 3.2 devido as contribuições de $\sigma_{xy}^z(1)$ e devido a $\sigma_{xy}^z(2)$. O resultado final para a condutividade Hall de spin σ_{xy}^z e as contribuições inter-ramos e intra-ramos separadas são colocadas no gráfico 3.3.

Figura 3.2. Condutividade Hall de spin total(rox) para os termos $\sigma_{xy}^z(1)$ (esquerda) e $\sigma_{xy}^z(2)$ (direita), resultado das contribuições inter-ramos(azul) e intra-ramos(vermelho).

Figura 3.3. Condutividade Hall de spin(rox) resultado da soma das contribuições inter-ramos(azul) e intra-ramos(vermelho). A condutividade σ_{xy}^z se anula para $\epsilon_F > \epsilon_o$ mas é não-nula em $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$. Note que a contribuição intra-ramos é responsável pela descontinuidade em $\epsilon_F = \epsilon_e$ e $\epsilon_F = \epsilon_o$.

Os gráficos 3.2 e 3.3 não correspondem a valores realistas para os parâmetros dos quais a condutividade Hall de spin depende. O próximo capítulo trata dos resultados do

cálculo autoconsistente onde os melhores valores realistas que conseguimos encontrar para a condutividade Hall de spin σ_{xy}^z são da ordem de $\frac{1}{1000}$ dos resultados vistos no gráfico 3.3.

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo, apresentamos resultados de nosso cálculo autoconsistente para a determinação da condutividade Hall de spin σ_{xy}^z . Consideramos vários poços quânticos simples e duplos. Contudo, nossos resultados indicam que a condutividade Hall de spin devido ao acoplamento spin órbita inter-subbanda é extremamente pequena nestes sistemas ($\sigma_{xy}^z \ll \frac{e}{8\pi}$); e possivelmente não mensurável experimentalmente.

4.1 Cálculo autoconsistente

Para resolvermos a equação de Schrödinger independente do tempo na heteroestrutura vamos utilizar o método numérico denominado diferenças finitas. Como condições de contorno impusemos que a função de onda deve ir a zero nos extremos da heteroestrutura, ou seja, nosso perfil de potencial está contido em um poço infinito. As soluções independem da condição de contorno pois as funções de onda vão a zero antes de chegar nos limites do poço infinito. Dessa forma obtemos um sistema de equações que quando escrito na forma matricial resulta numa matriz tridiagonal. Diagonalizando-a obtemos os energias e funções de onda (funções envelope) nos pontos da discretização. As funções de onda são usadas para determinarmos a intensidade do acoplamento spin órbita η .

Dopantes cedem elétrons ao poço quântico, estes com níveis de energia mais baixos que dessas impurezas doadoras. Pela aproximação de Hartree incluímos efeitos da interação

elétron-elétron coulombiana¹. O potencial de Hartree $V(z)$ é encontrado via solução da equação de Poisson, e esta equação diferencial depende da função que descreve a densidade eletrônica do sistema. Por fim, a densidade eletrônica é encontrada a partir das funções envelope das subbandas ocupadas. Então $V(z)$ é somado ao potencial estrutural e levado a equação de Schrödinger resultando em novas energias e novas funções envelope, estas usadas para resolver a equação de Poisson nos dando um novo potencial de Hartree. Esse procedimento é executado sucessivamente e para a situação de equilíbrio, o cálculo deve convergir. Como o cálculo de σ_{xy}^z foi feito a temperatura zero, a simulação também foi implementada nesse limite de temperatura².

Figura 4.1. Representação esquemática para o cálculo autoconsistente. O critério de parada para esse cálculo é a convergência das energia das iterações sucessivas.

A energia de Fermi precisa ser determinada no fim de todo o ciclo autoconsistente. A próxima seção trata de como determiná-la.

¹Para levarmos em conta a interação eletrostática elétron-elétron consideramos que cada elétron interage com a densidade de carga total. O potencial resultante dessa interação é denominada potencial de Hartree.

²Todo o procedimento descrito foi desenvolvido pelo autor dessa dissertação. Desenvolvi um procedimento semelhante ao de Calsaverini (38) e Calsaverini et al (37) que utilizam o método de Numerov para resolverem a Equação de Schrödinger. Os resultados para o cálculo desenvolvido pelo autor e pelas referências citadas foram testados por comparação de resultados em diversas heteroestruturas.

4.2 Nível de Fermi para o Hamiltoniano efetivo spin órbita inter-subbanda

Para o cálculo da condutividade Hall de spin σ_{xy}^z precisamos da energia de Fermi ϵ_F para o modelo efetivo (Hamiltoniano (2.16)) com duas subbandas com campo magnético. Mas como estamos interessados no cálculo de σ_{xy}^z no limite $\vec{B} \rightarrow 0$, determinaremos ϵ_F usando a relação de dispersão para o Hamiltoniano (2.16) sem $\vec{B}$. Esta relação de dispersão é dada por

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \epsilon_{\pm} \pm \sqrt{\epsilon_{\pm}^2 + \eta^2 k^2}, \quad (4.1)$$

onde $\epsilon_{\pm} = \frac{\epsilon_e \pm \epsilon_o}{2}$ e ϵ_e e ϵ_o são as energias da primeira e segunda subbanda, respectivamente. Na situação $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$ e supondo uma densidade bidimensional n_T , a energia de Fermi é dada por

$$\epsilon_F = \frac{\pi \hbar^2 n_T}{m^* (1 + \epsilon'_{SO})} + \epsilon_e, \quad (4.2)$$

e quando $\epsilon_F > \epsilon_o$ temos

$$\epsilon_F = \frac{\pi \hbar^2 n_T}{2m^*} + \epsilon_{+} + \epsilon'_{SO} \epsilon_{-}. \quad (4.3)$$

usando a notação $\epsilon'_{SO} = \frac{\epsilon_{SO}}{\epsilon_g}$.

Com os valores para energia de Fermi e η depois de completado o cálculo autoconsistente podemos calcular a condutividade Hall de spin. Repetimos então diversas vezes o cálculo autoconsistente para um conjunto de valores para a densidade eletrônica. Como a energia de Fermi do modelo efetivo depende da densidade de elétrons no poço quântico (equações (4.2) e (4.3)), alteramos o valor de $\kappa_2 = \frac{(\epsilon_F - \bar{\epsilon})}{\Delta\epsilon}$. Em cada iteração de todo o ciclo autoconsistente temos um valor para η e logo, um valor para σ_{xy}^z . Por fim, fazemos

³Note que o nível de Fermi para o modelo efetivo não é o mesmo que o determinado no cálculo autoconsistente.

o gráfico de σ_{xy}^z vs. κ_2 . Note que a expressão para σ_{xy}^z é determinada pela posição da energia de Fermi ϵ_F : $\epsilon_F > \epsilon_o$ ou $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$, ou seja, a expressão (3.71) ou (3.72), respectivamente. Os gráficos para a condutividade Hall de spin são feitos em termos do parâmetro κ_2 que é função da energia de Fermi. Esta tem seus valores variadas alterando a densidade de elétrons nos dopantes.

Na próxima seção analisamos os materiais mais promissores para os maiores valores para σ_{xy}^z . Reforçamos que a condutividade Hall de spin é dependente do parâmetro $\kappa_1 \propto \eta^2$ quando a energia de Fermi se localiza entre a energia da primeira e da segunda subbanda (equação (3.72)). Logo, maiores valores de η quando $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$ levam a maiores valores de σ_{xy}^z .

4.3 Escolha dos materiais

Esse trabalho tem como objetivo obter valores realistas para a condutividade Hall de spin. Para isso precisamos determinar de forma autoconsistente a intensidade do acoplamento spin órbita inter-subbanda η , pois $\sigma_{xy}^z = \sigma_{xy}^z(\eta)$ (ver equação (3.72)). Pelos trabalhos de Calsaverini(38) e Calsaverini et al(37) temos informações detalhadas de alguns sistemas promissores para encontrarmos os maiores valores possíveis para η (em módulo). Os resultados destes trabalhos(37, 38) mostram que as ligas de InSb apresentam os maiores η devido aos parâmetros de sua estrutura de bandas. As expressões para a intensidade do acoplamento spin órbita inter-subbanda devido a Hartree η_H (2.17) e devido ao perfil estrutural do poço η_w (2.18) são maiores para materiais com energia do *gap* pequena e energia de *split-off* grande, sendo o InSb um desses materiais. Assim, escolhemos heteroestruturas de $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}/\text{InSb}/\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$, onde x é a fração de átomos de In que são substituídos aleatoriamente por Al. Ainda nessas heteroestruturas, em poços simples com as menores larguras foram encontrados os maiores valores para η em módulo.

Partindo das equações (2.12) e analisando a figura 2.1⁴ como um poço simples (principal) mais uma barreira central. Usamos uma grandeza adimensional denominada *valence*

⁴As notações vistas na figura 2.1 foram introduzidas no capítulo 2.

band offset (VBO) (ver Calsaverini(38)) para sabermos quanto da energia do gap do espaçador (E_w) e da barreira E_b está distribuída para a banda de valência e quanto está na banda de condução. Encontramos assim os valores para a altura do poço principal δ_c e altura da barreira δ_c^b (ver figura 2.1) na banda de condução. Os parâmetros restantes da figura 2.1 são determinados usando

$$\delta_v = E_w - E_g - \delta_c, \quad (4.4)$$

$$\delta_v^b = E_b - E_g - \delta_c^b,$$

$$\delta_\Delta = \delta_v + \Delta_w - \Delta_g, \quad (4.5)$$

$$\delta_\Delta^b = \delta_v^b + \Delta_b - \Delta_g.$$

Note que para recuperarmos as equações que descrevem um poço simples fazemos todos as grandezas com índices da barreira iguais a zero. Os parâmetros usados para a energia do *gap* e energia de *split-off* para o poço simples se encontram nas tabelas 4.1 e 4.2.⁵

Tabela 4.1- Parâmetros de estrutura de bandas de InSb e AlSb

Parâmetros/Materiais	InSb	AlSb
E_g (eV)	0,235	1,696
Δ (eV)	0,81	0,676
m^*/m_0 (ad.)	0,0135	
E_p (eV)	23,3	

Tabela 4.2- Parâmetros de abaulamento e VBO para as ligas de $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$

Parâmetros/Materiais	$\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}$
C_{gap} (ad.)	0,43
C_Δ (ad.)	0,25
VBO (ad.)	0,19

Uma simplificação é introduzida no cálculo de η devido ao formato dos perfis do poço quântico principal e da barreira. Como os potenciais do poço e da barreira podem ser

⁵Para as ligas ternárias, os valores dessas energias são usadas interpolações dependentes de x como $E[A_xB_{1-x}C] = xE[AC] + (1-x)E[BC] - x(1-x)C_E[ABC]$. Onde $E[AB]$ é a energia do *gap* ou da energia de *split-off* para a liga AB e $C_E[ABC]$ é denominado parâmetro de abaulamento (*bowing parameter*) para a liga ABC . Esse procedimento é descrito em detalhes pela referência (41). Os dados das tabelas 4.1 e 4.2 também são encontrados em (41), onde o parâmetro E_p se relaciona com o elemento de matriz de Kane P da seguinte forma $E_p = \frac{2m}{\hbar^2} P^2$.

representados por uma função Heaviside, o cálculo dos elementos de matriz em (2.12) fica facilitado se usarmos que a derivada da Heaviside é a função delta. Assim, os elementos de matriz ficam:

$$\langle e | \frac{h_w(z)}{dz} | o \rangle = 2\psi_e \left(\frac{L}{2} \right) \psi_o \left(\frac{L}{2} \right) \quad (4.6)$$

$$\langle e | \frac{h_b(z)}{dz} | o \rangle = -2\psi_e \left(\frac{L_b}{2} \right) \psi_o \left(\frac{L_b}{2} \right) \quad (4.7)$$

Nos resta obter o potencial de Hartree e as funções envelope de forma auto-consistente, e com as funções envelope calcular os elementos de matriz $\langle e | V_H | o \rangle$ e as expressões (4.6) e (4.7). Com esses valores podemos calcular a intensidade do acoplamento spin órbita $\eta = \eta_w + \eta_H + \eta_b$ devido as contribuições do poço principal η_w (2.18), potencial de Hartree η_H (2.17) e da barreira η_b (2.19).

No entanto, nossa procura não se limita somente a busca de valores para η grandes. Os resultados para a condutividade Hall de spin total σ_{xy}^z (3.72) mostram que seu valor é não-nulo somente quando a energia de Fermi se localiza entre a energia da primeira e segunda subbandas. Assim, precisamos encontrar valores significativos para η que satisfaçam o critério $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$. Seguimos com os gráficos para a condutividade Hall de spin e análise dos resultados.

4.4 Análise dos resultados para a condutividade Hall de spin

Nesta seção apresentaremos resultados para a condutividade Hall de spin para poços quânticos simples e duplos de InSb⁶.

⁶Alertamos que em todos os poços quânticos simulados há a presença de um terceiro nível de energia ϵ_3 no poço, fato que contrasta com o modelo desenvolvido no capítulo 2. Podemos estimar o termo corretivo devido a presença desse terceiro nível considerando-o na base de soluções na qual escrevemos o Hamiltoniano 2.14. Seja então esse Hamiltoniano efetivo spin-órbita num poço quântico com 3 subbandas dado por $H_{6 \times 6} = \begin{pmatrix} H_s & H_{sw} \\ H_{ws} & H_w \end{pmatrix}$, onde H_s corresponde ao Hamiltoniano spin-órbita em poços quânticos

4.4.1 Poços quânticos simples: $\text{Al}_{0,3}\text{In}_{0,7}\text{Sb}/\text{InSb}$

Como mencionamos anteriormente, os maiores resultados em módulo para a constante de acoplamento spin órbita inter-subbanda foram encontrados em Calsaverini(38) em poços simples de InSb com menores larguras. A principal razão para o aumento em módulo de η com o aumento da largura do poço vem da contribuição do potencial estrutural. A competição da contribuição estrutural com Hartree analisado em (38) mostra que a primeira (η_w) altera mais o valor de η que a segunda (η_H). Então, pela equação (4.6) a contribuição para o valor de $|\eta|$ depende da amplitude da função envelope na borda do poço. Logo, em poços mais largos a penetração da função envelope é menor reduzindo a contribuição para $|\eta|$.

Figura 4.2. Condutividade Hall de spin total σ_{xy}^z (preto) devido à contribuições inter-ramos (vermelho) e intra-ramos (azul) num poço simples com largura de 20 nm.

Sabemos novamente por Calsaverini(38) que η cresce com a densidade de elétrons no poço. Crescimento esse devido ao aumento da amplitude do potencial de Hartree com o aumento do número de elétrons. Assim, simulamos poços com larguras maiores como 25

com duas subbandas, H_w corresponde ao bloco relativo a presença do terceiro nível no poço quântico e $H_{sw} = H_{ws}^\dagger$ acopla os blocos H_w e H_s . Realizando o procedimento denominado *folding down* (ver seção 2.4) para obtermos um Hamiltoniano efetivo $H_{ef(SO)}$ para o poço quântico com duas subbandas ficamos com $H_{ef(SO)} = H_s + H_{sw} (E - H_w)^{-1} H_{ws}$. Claramente o termo corretivo devido a presença de um terceiro nível no poço quântico depende inversamente das diferenças das energias das subbandas. Mas pelas simulações este nível de energia está mais afastado do segundo nível ϵ_o do que o segundo nível está afastado do primeiro ϵ_e . Ou seja, $\epsilon_3 - \epsilon_o \gg \epsilon_o - \epsilon_e$, recuperando de forma aproximada a validade do modelo teórico desenvolvido no capítulo 2 para os resultados.

nm e 30 nm a fim de buscar maiores densidades eletrônicas no intervalo $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$, e consequentemente maiores valores para $|\eta|$. Isso não ocorre pois o aumento na densidade de elétrons com o aumento do poço é mais lento que a diminuição em $|\eta|$ devido a esse aumento da largura. Soma-se a esse resultado o fato que os níveis de energia diminuem com o alargamento do poço, diminuindo o valor para a densidade eletrônica que leve a um valor para a energia de Fermi que satisfaça $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$. Logo, os maiores valores para σ_{xy}^z são encontrados nos poços de 20 nm na região próxima a $\epsilon_F = \epsilon_o$.

Figura 4.3. Figura semelhante a 4.2 mas num poço simples com largura de 25 nm.

Figura 4.4. Figura semelhante a 4.2 mas num poço simples com largura de 30 nm.

Os resultados indicam que o maior valor para σ_{xy}^z ocorre na descontinuidade $\sigma_{xy}^z = -0,00402 \frac{e}{8\pi}$ em poços de $L = 20$ nm. Em poços com largura $L = 25$ nm e $L = 30$ nm temos $\sigma_{xy}^z = -0,00223 \frac{e}{8\pi}$ e $\sigma_{xy}^z = -0,00161 \frac{e}{8\pi}$, respectivamente. Como esperado, na

região $\epsilon_F > \epsilon_o$ a condutividade Hall de spin se anula.

Simularemos na seção seguinte (4.4.2) poços quânticos duplos em busca de valores maiores para σ_{xy}^z . Infelizmente, tais sistemas levaram a resultados ainda menores.

4.4.2 Poços quânticos duplos: $\text{Al}_{0,4}\text{In}_{0,6}\text{Sb}/\text{InSb}$ com barreira $\text{Al}_{0,12}\text{In}_{0,88}\text{Sb}$

De forma geral, em poços duplos as energias da primeira e segunda subbanda se aproximam consideravelmente, sendo da ordem de alguns meV 's para poços com altura de centenas de meV 's. Assim, a densidade de elétrons precisa ser muito pequena (da ordem de 10^9 elétrons/ cm^2) ficando a posição do nível de Fermi abaixo do segundo nível ϵ_o . Condição esta para que σ_{xy}^z seja não-nulo. Somado a isso, a contribuição para η devido a barreira tem sinal contrário a contribuição de Hartree e do poço principal, diminuindo em módulo o valor de η .

Simulamos uma heteroestrutura de $\text{Al}_{0,4}\text{In}_{0,6}\text{Sb}/\text{InSb}$ com uma barreira de $\text{Al}_{0,12}\text{In}_{0,88}\text{Sb}$ com largura de 5 nm. O poço quântico principal possui largura de 100 nm.

Figura 4.5. Condutividade Hall de spin total σ_{xy}^z (preto) devido à contribuições inter-ramos (vermelho) e intra-ramos (azul) em poços com largura de 100 nm e barreira central com largura de 5 nm.

Os resultados mostram que na descontinuidade a $\sigma_{xy}^z = -1,264 \cdot 10^{-5} \frac{e}{8\pi}$. Resultado muito inferior ao encontrado para todas as larguras em poços simples. Assim, os poços duplos

são sistemas ainda menos promissores para obtermos uma condutividade Hall de spin com valores próximos a $\frac{e}{8\pi}$.

Capítulo 5

Conclusões

Calculamos a condutividade Hall de spin σ_{xy}^z num gás de elétrons bidimensional formado num poço quântico simétrico com dois níveis de energia. Obtivemos para σ_{xy}^z um valor nulo quando $\epsilon_F > \epsilon_o$. No entanto, quando $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$, o resultado encontrado foi valor não nulo, com comportamento não monótono e que sofre inversão de sinal. Apesar do resultado não nulo, em contraste com Rashba, o cálculo autoconsistente mostrou que σ_{xy}^z é da ordem, em poços simples de InSb, de $\frac{1}{1000} \frac{e}{8\pi}$. Ou seja, muito pequena sinalizando para uma impossibilidade de medição experimental. O resultado é ainda menor em poços quânticos com barreira devido a valores ainda menores para η na posição $\epsilon_e < \epsilon_F < \epsilon_o$. A mudança na densidade de estados (3.75) quando $\epsilon_F = \epsilon_o$, está relacionada com a descontinuidade (3.73) nesse mesmo ponto (equação (3.76)).

Para o cálculo de σ_{xy}^z foi preciso revisar e reproduzir os resultados do trabalho de Calsaverini (38) e Calsaverini et al (37) para obtermos os maiores valores para a intensidade de acoplamento spin-órbita η nas simulações numéricas. Também desenvolvemos em linhas gerais um estudo sobre teoria de resposta linear. Esse formalismo desenvolvido nos permitiu aplicar ao nosso problema no cálculo de σ_{xy}^z e sua aplicação em correntes de spin.

Sugerimos como continuação do trabalho uma generalização do cálculo realizado, mas agora em poços assimétricos com dois níveis de energia nos quais a contribuição devido a Rashba não é mais nula. Novos termos para a condutividade Hall de spin podem contribuir de maneira mais significativa levando a resultados, em princípio, mensuráveis.

A busca por materiais onde a intensidade η seja uma ordem de grandeza maior que os valores encontrados até agora pode levar a situações como mostrada pelo gráfico (3.3) tornando mais viável a busca por geração de correntes de spin nesses sistemas.

Apêndice A

Elementos de matriz para o cálculo de σ_{xy}^z

Vamos calcular os elementos de matriz usados no cálculo de σ_{xy}^z (3.33). Usaremos para isso os auto-estados (2.26) e (2.27) e os operadores k_x , $\tau_x \otimes \sigma_x$ e $\tau_y \otimes \sigma_x$. Para tanto, é necessário fazer uma mudança de base já que os operadores foram escritos a partir do Hamiltoniano (2.16) na base $\{|e \uparrow\rangle, |e \downarrow\rangle, |o \uparrow\rangle, |o \downarrow\rangle\}$ e os auto-vetores foram calculados na base $\{|e \uparrow\rangle, |o \downarrow\rangle, |o \uparrow\rangle, |e \downarrow\rangle\}$, a qual deixava o Hamiltoniano (2.16) na forma de uma matriz bloco-diagonal mais facilmente diagonalizável. Assim, os elementos de matriz dos operadores abaixo são calculados após essa mudança de base.

Para o operador k_x definido como

$$k_x = \frac{a^\dagger + a}{\sqrt{2}l_b}, \quad (1)$$

temos os seguintes elementos de matriz

$$\langle \lambda k n \mu | k_x | \lambda' k' n' \mu' \rangle = \frac{\delta_{\lambda\lambda'} \delta_{kk'}}{\sqrt{2}l_b} \langle n \mu | a^\dagger + a | n \mu \rangle, \quad (2)$$

$$\langle \lambda k n \mu | k_x | \lambda' k' n' \mu' \rangle = \langle \lambda' k' n' \mu' | k_x | \lambda k n \mu \rangle, \quad (3)$$

$$\langle \lambda kn+ | k_x | \lambda kn+1+ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}l_b} \left(\sqrt{n+1} \sin \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \sin \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2} + \sqrt{n} \cos \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \cos \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2} \right), \quad (4)$$

$$\langle \lambda kn+ | k_x | \lambda kn+1- \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}l_b} \left(\sqrt{n+1} \sin \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \cos \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2} - \sqrt{n} \cos \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \sin \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2} \right), \quad (5)$$

$$\langle \lambda kn+ | k_x | \lambda kn+1- \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}l_b} \left(\sqrt{n+1} \cos \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \sin \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2} - \sqrt{n} \sin \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \cos \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2} \right), \quad (6)$$

e

$$\langle \lambda kn+ | k_x | \lambda kn+1+ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}l_b} \left(\sqrt{n+1} \cos \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \cos \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2} + \sqrt{n} \sin \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \sin \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2} \right). \quad (7)$$

Esses resultados para os elementos de matriz do operador k_x são particularmente importantes pois, este operador se relaciona com o termo perturbativo $W(t)$ do Hamiltoniano. Ligando este fato com a Teoria de Perturbação dependente do tempo, na qual as correções de primeira ordem para a função de onda devido a perturbação se relacionam com elementos de matriz de $W(t)$ dos estados do Hamiltoniano não perturbado. Podemos então concluir que os elementos não nulos do operador k_x nos dão a regra de seleção para as transições que constroem a função de onda perturbada. Assim, $n \rightarrow n \pm 1$ são as transições permitidas dadas pelas regras de seleção encontradas nos elementos de matriz de k_x .

Agora calculamos os elementos de matriz para $\tau_x \otimes \sigma_x$. Obtemos

$$\langle \lambda kn+ | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda kn+1+ \rangle = -i \sin \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \cos \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2}, \quad (8)$$

$$\langle \lambda kn+ | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda kn+1- \rangle = +i \sin \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \sin \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2}, \quad (9)$$

$$\langle \lambda kn- | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda kn+1+ \rangle = -i \cos \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \cos \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2}, \quad (10)$$

e

$$\langle \lambda kn- | \tau_x \otimes \sigma_x | \lambda kn+1- \rangle = +i \cos \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \sin \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2}. \quad (11)$$

A seguir calculamos os elementos para o operador $\tau_y \otimes \sigma_x$ temos

$$\langle \lambda kn+ | \tau_y \otimes \sigma_x | \lambda kn+1+ \rangle = -\lambda \sin \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \cos \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2}, \quad (12)$$

$$\langle \lambda kn+ | \tau_y \otimes \sigma_x | \lambda kn+1- \rangle = +\lambda \sin \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \sin \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2}, \quad (13)$$

$$\langle \lambda kn- | \tau_y \otimes \sigma_x | \lambda kn+1+ \rangle = -\lambda \cos \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \cos \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2}, \quad (14)$$

e

$$\langle \lambda kn- | \tau_y \otimes \sigma_x | \lambda kn+1- \rangle = +\lambda \cos \frac{\theta_{\lambda n}}{2} \sin \frac{\theta_{\lambda n+1}}{2}. \quad (15)$$

Os elementos de matriz calculados acima são usados nas seções 3.3.3 e 3.3.4. As expressões trigonométricas $\cos \theta_{\lambda n}$ e $\sin \theta_{\lambda n}$ são encontradas na seção 2.5.

Apêndice B

Aproximações para σ_{xy}^z no limite de campo magnético nulo

Neste apêndice detalhamos o cálculo no limite $\vec{B} \rightarrow 0$ das expressões encontradas nas seções 3.3.3 e 3.3.4 na determinação da condutividade Hall de spin. Nesses cálculos, os resultados que obtivemos para σ_{xy}^z antes de tomarmos o limite de $\vec{B} \rightarrow 0$ dependem de $n_{\lambda\mu}$ e $\gamma_{\lambda n_{\lambda\mu}}$ definidas pela equação (2.25). Tanto $n_{\lambda\mu}$ quanto $\gamma_{\lambda n_{\lambda\mu}}$ dependem de $\vec{B}$ implicitamente pelos parâmetros ϵ_{SO} e ϵ_g definidos na seção (2.5). Definiremos um novo parâmetro $\tilde{\epsilon}$, que se relaciona com ϵ_{SO} e ϵ_g , sendo nas simplificações o único parâmetro que depende de $\vec{B}$. Seguimos então usando as expressões $\kappa_1 = \frac{\epsilon_{SO}}{\epsilon_g}$ e $\kappa_2 = \frac{(\epsilon_F - \tilde{\epsilon})}{\Delta\epsilon}$ e definindo as grandezas:

$$\tilde{\eta} = \frac{\kappa_1 \Delta\epsilon}{\hbar\omega_c} \quad (16)$$

e

$$\tilde{\epsilon} = \frac{\kappa_2 \Delta\epsilon}{\hbar\omega_c}. \quad (17)$$

Ainda definimos $\frac{\epsilon_F}{\hbar\omega_c}$. Isolando $n_{\lambda\mu}$ na relação de dispersão (2.25) e usando as expressões (16) e (17) ficamos com

$$n_\mu = \epsilon_F + \frac{\tilde{\eta}^2}{2} + \mu \sqrt{\frac{\tilde{\eta}^4}{4} + \tilde{\eta}^2 \epsilon_F + \zeta_\lambda^2}. \quad (18)$$

Precisamos diferenciar o valor inteiro de $n_{\lambda\mu}$, denotado por $\tilde{n}_{\lambda\mu}$, e o valor encontrado em (18). Essa distinção deve ser feita já que somente números inteiros positivos podem indexar os níveis de Landau. A diferença entre esses valores fica $\delta n_{\lambda\mu} \equiv \tilde{n}_{\lambda\mu} - n_{\lambda\mu}$, onde no limite $B \rightarrow 0$ temos $\delta n_{\lambda\mu} \rightarrow \frac{1}{2}$. Dividindo (18) por $\tilde{\epsilon}$ e deixando $n_{\lambda\mu}$ em termos de $\tilde{n}_{\lambda\mu}$ e $\delta n_{\lambda\mu}$ ficamos com

$$\frac{n_\mu}{\tilde{\epsilon}} = \frac{\tilde{n}_\mu}{\tilde{\epsilon}} - \frac{\delta n_{\lambda\mu}}{\tilde{\epsilon}} = \kappa_2 + \frac{\kappa_2}{2} + \mu \sqrt{\frac{\kappa_2^2}{2} + \kappa_1 \kappa_2 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\tilde{\epsilon}} - \lambda \right)^2}. \quad (19)$$

Dividindo $\gamma_{\lambda n}$ por $\tilde{\epsilon}$

$$\frac{\gamma_{\lambda n}}{\tilde{\epsilon}} = \sqrt{\frac{n}{\tilde{\epsilon}} \kappa_1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\tilde{\epsilon}} - \lambda \right)^2}. \quad (20)$$

No limite de campo magnético nulo o termo $\frac{1}{\tilde{\epsilon}}$ tende a zero. Assim, nas expressões que dependem desse termo podemos fazer expansões levando em conta no resultado somente os termos que contribuem para σ_{xy}^z . Ou seja, precisamos isolar em cada expressão encontrada somente a ordem zero em $O(\frac{1}{\tilde{\epsilon}})^k$ a qual contribuirá para a condutividade após tomarmos $B \rightarrow 0$. Expandimos as expressões importantes para chegar nos resultados finais. Temos assim

$$\frac{\tilde{n}_{\lambda\mu}}{\tilde{\epsilon}} = \tilde{\epsilon} \left(\kappa_2 + \frac{\kappa_1}{2} + \mu \kappa_3 - \frac{\mu \lambda}{4 \kappa_3} \right) + O\left(\frac{1}{\tilde{\epsilon}}\right), \quad (21)$$

$$\frac{\tilde{\gamma}_{n_{\lambda\mu}}}{\tilde{\epsilon}} = \kappa_3 + \mu \frac{\kappa_3}{2} - \frac{\lambda}{4 \kappa_3 \tilde{\epsilon}} - \frac{\kappa_1 \delta n_{\lambda\mu}}{2(\kappa_3 + \frac{\mu \kappa_1}{2}) \tilde{\epsilon}} + O\left(\frac{1}{\tilde{\epsilon}}\right)^2, \quad (22)$$

$$\frac{\tilde{\gamma}_{n_{\lambda\mu}+1}}{\tilde{\epsilon}} = \kappa_3 + \mu \frac{\kappa_3}{2} - \frac{\lambda}{4 \kappa_3 \tilde{\epsilon}} - \frac{\kappa_1 (1 - \delta n_{\lambda\mu})}{2(\kappa_3 + \frac{\mu \kappa_1}{2}) \tilde{\epsilon}} + O\left(\frac{1}{\tilde{\epsilon}}\right)^2, \quad (23)$$

$$\frac{n_{\lambda\mu}}{\gamma_{n_{\lambda\mu}}}, \frac{n_{\lambda\mu} + 1}{\gamma_{n_{\lambda\mu}+1}} = \frac{\kappa_2 + \frac{\kappa_1}{2} + \mu \kappa_3}{\kappa_3 + \frac{\mu \kappa_1}{2}} + O\left(\frac{1}{\tilde{\epsilon}}\right), \quad (24)$$

$$\frac{n}{\gamma_{\lambda n}}, \frac{n+1}{\gamma_{n+1}} = \frac{\frac{n}{\tilde{\epsilon}}}{\sqrt{\frac{n}{\tilde{\epsilon}}\kappa_1 + \frac{1}{4}}} + O\left(\frac{1}{\tilde{\epsilon}}\right), \quad (25)$$

$$\frac{\tilde{\epsilon}^2}{(\gamma_{n+1} + \gamma_n)^2 - 1} = \frac{1}{4\left(\frac{n}{\tilde{\epsilon}}\kappa_1 + \frac{1}{4}\right)} + O\left(\frac{1}{\tilde{\epsilon}}\right), \quad (26)$$

$$\frac{\zeta_\lambda}{\gamma_{n_{\lambda\mu}}}, \frac{\zeta_\lambda}{\gamma_{n_{\lambda\mu}+1}} = \frac{\frac{-\lambda}{2}}{\kappa_3 + \frac{\mu\kappa_1}{2}} + O\left(\frac{1}{\tilde{\epsilon}}\right), \quad (27)$$

e

$$\frac{\zeta_\lambda}{\gamma_n}, \frac{\zeta_\lambda}{\gamma_{n+1}} = \frac{\frac{-\lambda}{2}}{\sqrt{\frac{n}{\tilde{\epsilon}}\kappa_1 + \frac{1}{4}}} + O\left(\frac{1}{\tilde{\epsilon}}\right). \quad (28)$$

Usaremos essas expressões acima nas seções 3.3.3 e 3.3.4. Tomando o limite de $\vec{B} \rightarrow 0$ usando os resultados desse apêndice, em conjunto com as regras de seleção dadas pelo apêndice A, calculamos σ_{xy}^z a partir da expressão (3.33).

Referências

- 1 CHEN, T.-W.; HUANG, C.-M.; GUO, G. Y. Conserved spin and orbital angular momentum Hall current in a two-dimensional electron system with Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling. *Physical Review B*, v. 73, n. 23, p. 5309–5321, 2006.
- 2 WOLF, S. et al. Spintronics: a spin-based electronics vision for the future. *Science*, v. 294, n. 5546, p. 1488–1495, 2001.
- 3 ZAWADZKI, W.; PFEFFER, P. Average forces in bound and resonant quantum states. *Physical Review B*, v. 64, n. 23, p. 5313–5318, 2001.
- 4 SILVA, E. A. d. A. Spin-orbit splitting in the conduction subband of semiconductor asymmetric heterostructures. *Brazilian Journal of Physics*, v. 26, n. 1, p. 144–150, 1996.
- 5 SILVA, E. A. d. A. Spin-orbit splitting of electronic states in semiconductor asymmetric quantum wells. *Physical Review B*, v. 55, n. 24, p. 16293–16299, 1997.
- 6 DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, v. 56, n. 7, p. 665–667, 1990.
- 7 NITTA, J. et al. Gate control of spin-orbit interaction in an inverted $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ heterostructure. *Physical Review Letters*, v. 78, n. 7, p. 1335–1338, 1997.
- 8 SCHLIEMANN, J.; EGUES, J.; LOSS, D. Nonballistic spin-field-effect transistor. *Physical Review Letters*, v. 90, n. 14, p. 6801–6805, 2003.
- 9 DYAKONOV, M.; PEREL, V. Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Physics Letters A*, v. 35, n. 6, p. 459–460, 1971.

-
- 10 SHI, J. et al. Proper definition of spin current in spin-orbit coupled systems. *Physical Review Letters*, v. 96, n. 7, p. 6604–6607, 2006.
 - 11 SUN, Q.; XIE, X. Definition of the spin current: The angular spin current and its physical consequences. *Physical Review B*, v. 72, n. 24, p. 5305–5311, 2005.
 - 12 MEDINA, E.; LOPEZ, A.; BERCHE, B. Gauge symmetry breaking and topological quantization for the Pauli Hamiltonian. *Europhysics Letters*, v. 83, n. 4, p. 47005–47009, 2008.
 - 13 RASHBA, E. Spin currents in thermodynamic equilibrium: The challenge of discerning transport currents. *Physical Review B*, v. 68, n. 24, p. 1315–1318, 2003.
 - 14 HIRSCH, J. Spin Hall effect. *Physical Review Letters*, v. 83, n. 9, p. 1834–1837, 1999.
 - 15 MURAKAMI, S.; NAGAOSA, N.; ZHANG, S. Dissipationless quantum spin current at room temperature. *Science*, v. 301, n. 5638, p. 1348–1351, 2003.
 - 16 SINOVA, J. et al. Universal intrinsic spin Hall effect. *Physical Review Letters*, v. 92, n. 12, p. 6603–6607, 2004.
 - 17 ZHANG, S.; YANG, Z. Intrinsic spin and orbital angular momentum Hall effect. *Physical Review Letters*, v. 94, n. 6, p. 6602–6605, 2005.
 - 18 REYNOSO, A.; USAJ, G.; BALSEIRO, C. Spin Hall effect in clean two-dimensional electron gases with Rashba spin-orbit coupling. *Physical Review B*, v. 73, n. 11, p. 5342–5350, 2006.
 - 19 NIKOLIC, B. et al. Nonequilibrium spin hall accumulation in ballistic semiconductor nanostructures. *Physical Review Letters*, v. 95, n. 4, p. 6601–6604, 2005.
 - 20 GUO, G. Y. et al. Intrinsic spin Hall effect in platinum: First-principles calculations. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 9, p. 6401–6404, 2008.
 - 21 SAITOH, E. et al. Conversion of spin current into charge current at room temperature: Inverse spin-Hall effect. *Applied Physics Letters*, v. 88, n. 18, p. 5313–5318, 2006.

- 22 KOENIG, M. et al. Quantum spin hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science*, v. 318, n. 5851, p. 766–770, 2007.
- 23 KATO, Y. et al. Observation of the spin hall effect in semiconductors. *Science*, v. 306, n. 5703, p. 1910–1913, 2004.
- 24 WUNDERLICH, J. et al. Experimental observation of the spin-Hall effect in a two-dimensional spin-orbit coupled semiconductor system. *Physical Review Letters*, v. 94, n. 4, p. 7204–7207, 2005.
- 25 ENGEL, H.; HALPERIN, B.; RASHBA, E. Theory of spin hall conductivity in n-doped GaAs. *Physical Review Letters*, v. 95, n. 16, p. 6605–6608, 2005.
- 26 SIH, V. et al. Generating spin currents in semiconductors with the spin hall effect. *Physical Review Letters*, v. 97, n. 9, p. 6605–6608, 2006.
- 27 STERN, N. P. et al. Current-induced polarization and the spin hall effect at room temperature. *Physical Review Letters*, v. 97, n. 12, p. 6603–6606, 2006.
- 28 SIH, V. et al. Spatial imaging of the spin Hall effect and current-induced polarization in two-dimensional electron gases. *Nature Physics*, v. 1, n. 1, p. 31–35, 2005.
- 29 STERN, N. P. et al. Time-resolved dynamics of the spin Hall effect. *Nature Physics*, v. 4, n. 11, p. 843–846, 2008.
- 30 VALENZUELA, S.; TINKHAM, M. Direct electronic measurement of the spin Hall effect. *Nature*, v. 442, n. 7099, p. 176–179, 2006.
- 31 BRUENE, C. et al. Ballistic Intrinsic Spin-Hall Effect in HgTe Nanostructures. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/0812.3768>>. Acesso em: 19 dez. 2008.
- 32 INOUE, J.; BAUER, G.; MOLENKAMP, L. Diffuse transport and spin accumulation in a Rashba two-dimensional electron gas. *Physical Review B*, v. 67, n. 3, p. 3104–3107, 2003.

-
- 33 RASHBA, E. Sum rules for spin Hall conductivity cancellation. *Physical Review B*, v. 70, n. 20, p. 1309–1312, 2004.
- 34 CHALAEV, O.; LOSS, D. Spin-Hall conductivity due to Rashba spin-orbit interaction in disordered systems. *Physical Review B*, v. 71, n. 24, p. 5318–5325, 2005.
- 35 DIMITROVA, O. Vanishing spin-Hall conductivity in 2D disordered Rashba electron gas. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/cond-mat/0405339>>. Acesso em: 19 dez. 2008.
- 36 BERNARDES, E. et al. Spin-orbit interaction in symmetric wells with two subbands. *Physical Review Letters*, v. 99, n. 7, p. 6603–6607, 2007.
- 37 CALSAVERINI, R. S. et al. Intersubband-induced spin-orbit interaction in quantum wells. *Physical Review B*, v. 78, n. 15, p. 5313–5329, 2008.
- 38 CALSAVERINI, R. *Acoplamento spin-órbita inter-subbanda em heteroestruturas semicondutoras*. 2007. 98 p. Dissertação (Mestrado em Física) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.
- 39 LUTTINGER, J. M.; KOHN, W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Physical Review*, v. 97, n. 4, p. 869 – 883, 1955.
- 40 KUBO, R. Statistical-mechanical theory of irreversible processes I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 12, n. 6, p. 570–586, 1957.
- 41 VURGAFTMAN, I.; MEYER, J.; RAM-MOHAN, L. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, v. 89, n. 11, Part 1, p. 5815–5875, 2001.