UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

DIEGO PAIVA PIRES

**Modelo de Kane 8×8 para a estrutura eletrônica de
wurtzitas**

São Carlos
2013

DIEGO PAIVA PIRES

Modelo de Kane 8×8 para a estrutura eletrônica de
wurtzitas

*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: Esmerindo de Sousa Bernardes

Versão corrigida

(versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

2013

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTES-
TE 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,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Pires, Diego Paiva

Modelo de Kane 8×8 para a estrutura eletrônica de wurtzitas / Diego Paiva Pires; orientador Esmerindo de Sousa Bernardes - versão corrigida - São Carlos, 2013.

265 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Básica) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2013.

1. Semicondutores. 2. Spintrônica. 3. Método $k \cdot p$. 4. Modelo de Kane 8×8 . 5. Wurtzita. I. Bernardes, Esmerindo de Sousa, orient. II. Título.

“If we want to solve a problem that we have never solved before, we must leave the door to the unknown ajar.”

Richard P. Feynman, *What do you care what other people think?*

“A ciência universal seria o ideal. Mas a prática é bem diferente. Felizmente, todo segredo dura pouco.”

César Lattes

Para todos aqueles que ainda acreditam que o futuro deste país passa, obrigatoriamente, pela educação.

AGRADECIMENTOS

Por ter consciência de que nenhuma conquista é solitária, a gratidão representa a forma mais simples de retribuir as influências positivas de todas as pessoas que de uma forma ou outra estiveram comigo em mais uma etapa de meu processo de formação. De imediato peço desculpas por aqueles nomes que eventualmente não constarem nesta lista e espero reparar esta omissão de alguma forma.

Antes de mais nada, gostaria de agradecer ao meu orientador neste projeto de mestrado, Prof. Dr. Esmerindo de Sousa Bernardes, pela oportunidade, paciência e atenção nestes dois anos de trabalho. Seu equilíbrio e sensatez na arte de orientar, aliado ao espaço e liberdade para fazer ciência dados a mim como estudante, foram realmente indispensáveis para o bom andamento e conclusão deste projeto.

Como toda pessoa tem seu histórico de formação acadêmica, o meu se inicia na Universidade Federal de São Carlos (UFSCar). Durante o período da graduação fui agraciado com a chance de conviver com excelentes professores dos quais sempre me lembrarei com muito orgulho. No que se refere ao Departamento de Física (DF) desta universidade destaco, dentre outros, Adenilson Chiquito, Celso Villas Boas, César Constantino, Giuliano Augustus, Gustavo Rigolin, Jayme Vicente, Nelson Studart, Paulo Daniel Emmel, Paulo Farinas, Salomon Mizrahi e Vivaldo Campo. Quanto ao Departamento de Matemática (DM), como esquecer de Cesar Rogério, Daniel Vendrúscolo, Liane Bordignon, Marcus Vinícius, Mário Matos e Rafael Kapp. Me esforçarei para que minhas atitudes sejam sempre pontuadas pelo exemplo e profissionalismo destes docentes.

Ainda falando dos professores que compõem o quadro de docentes do DF-UFSCar, gostaria de agradecer aqui ao meu orientador na iniciação científica, à pessoa do Prof. Dr. Márcio José Martins, que concedeu-me o primeiro contato com o estudo de uma física de ponta. Agradeço profundamente pela atenção e paciência dedicadas a mim. Tenho plena consciência da oportunidade ímpar que me foi oferecida e tentei aproveitá-la ao máximo.

A mudança de instituição acadêmica nem sempre é simples uma vez que lhe obriga a construir novos vínculos e estabelecer contato com idéias um tanto quanto distintas.

Entretanto, nada tenho a reclamar já que o Instituto de Física de São Carlos (IFSC/USP) proporcionou-me contato com pessoas de um caráter invejável e profissionalismo exemplar.

Neste âmbito, agradeço ao Prof. Dr. Miled Hassan Youssef Moussa e à Profa. Dra. Tereza Cristina Rocha Mendes pelas agradáveis discussões sobre física em geral e pelas conversas a respeito de aspectos peculiarmente mundanos, além dos sinceros e muito úteis aconselhamentos acerca desta nem sempre grata carreira. Sempre fui prestativamente recebido em suas salas quando precisei de amigos para conversar.

Aos meus amigos e colegas de sala Carlos Alexandre Brasil, Guilherme Inocentini, Guilherme Nery Prata e Leonardo Andreta de Castro os mais sinceros agradecimentos pelas discussões sobre ciência, filosofia e tudo mais, em geral sempre acompanhadas de um indispensável café. Jamais esquecerei destas pessoas que me acolheram tão bem no Grupo de Métodos Matemáticos e Ciências Moleculares.

Falando neste grupo, recordarei sempre das conversas com o Prof. Dr. José Eduardo Martinho Hornos acerca de física, história e política, sempre muito abrangentes e contextualizadas. Como esquecer ainda do Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano, uma das pessoas mais cultas que conheci e de um profundo conhecimento em física e matemática.

Seria muito injusto não mencionar aqui a ampla gama de setores cujo apoio incondicional foi (e será sempre) essencialmente indispensável para o desenvolvimento deste e todos os demais trabalhos dos estudantes do IFSC: Serviço de Graduação, Serviço de Pós-Graduação (agradecimentos especiais ao Ricardo, Patrícia e Silvio), Serviço de Gráfica, Serviço de Biblioteca e Informação, Seção Técnica de Informática e Assistência Técnica Financeira.

Aos amigos da pós-graduação Carlos Eduardo Máximo, César Augustus Uliana e Felipe Penha agradeço pelas discussões, conversas e solidariedade nos momentos de tormenta. Agradeço ainda a Thiago Mosqueiro que, além de extremamente solícito, apresentou contribuições de extrema importância no desenvolvimento deste trabalho.

À família Bernardes, em face dos constantes auxílios durante toda minha estadia na cidade de São Carlos.

Por fim, agradeço a todos os meus familiares que, de uma forma ou outra, estiveram

presentes comigo nesta caminhada e me ajudaram com sua disponibilidade, solidariedade e confiança em mais uma etapa do meu processo de formação.

À minha mãe Sandra Paiva Silva, minha avó Jerônima Madalena de Paiva e minha irmã Clarice Paiva Lima Silva, meus maiores e mais sinceros agradecimentos. Obrigado pelo crédito e investimento na minha escolha profissional, além me ensinarem desde muito cedo que o maior e único legado do ser humano é o conhecimento. Minha dívida com vocês será eterna.

RESUMO

PIRES, D. P. **Modelo de Kane 8×8 para a estrutura eletrônica de wurtzitas**. 2013. 265 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2013.

A interação spin-órbita tem desempenhado um papel crucial no desenvolvimento de dispositivos semicondutores de baixa dimensionalidade. Em resultados recentes abordando o modelo de Kane para sistemas cúbicos, particularmente redes zincblende, hamiltonianos efetivos são calculados por meio da técnica algébrica conhecida como *folding down* seguida de um processo de linearização até segunda ordem no inverso do gap de energia com a devida correção na normalização do espinor da banda de condução [PRL 99, 076603 (2007); PRB 78, 155313 (2008)]. Motivados por estes estudos, este trabalho se concentra no estudo algébrico da estrutura eletrônica de semicondutores de rede wurtzita. Usando as simetrias da rede hexagonal, o modelo de Kane 8×8 é formulado levando em conta todos os acoplamentos mediados pelos operadores momentum linear e angular de spin. Mostramos que a base de oito estados vinda da diagonalização exata da matriz associada à interação spin-órbita fornece um tratamento unificado entre os sistemas hexagonal e cúbico, o que pode ser muito útil no estudo de politipismos. Através de um modelo efetivo baseado na expansão em ordens do inverso do gap de energia, determinamos a equação que descreve o comportamento de um elétron de condução em poços quânticos e em estruturas semicondutoras na fase *bulk*. Em particular, destacamos a presença de massas efetivas e a emergência de uma interação dependente em spin na forma do operador helicidade no plano já em primeira ordem de aproximação, algo não observado em sistemas cúbicos. A heteroestrutura é investigada no âmbito do modelo de uma e duas subbandas dos poços quânticos das junções semicondutoras. Incluindo o campo de radiação, encontramos a equação efetiva que descreve a interação elétron-fóton analisando ainda as taxas de transição óptica do sistema. Observa-se que as transições ópticas são diretamente mediadas por spin e dependem da direção de incidência do fóton seja no poço quântico ou na monoestrutura semicondutora. Uma vez que estas transições ópticas induzem a mudança na orientação do spin eletrônico, estes resultados podem ser úteis na construção de novos dispositivos optoeletrônicos tendo a wurtzita como cenário. Considerando o hamiltoniano em primeira ordem no inverso do gap de energia relativo ao modelo de uma subbanda, verificamos que a evolução temporal do operador posição do elétron de condução varia linearmente no tempo e não exhibe o efeito *Zitterbewegung*. Associado a evolução temporal dos operadores de spin que oscilam no tempo, o movimento linear garante a formação de um campo harmônico onde os spins precessam. Como apontado no caso cúbico, a precessão do spin de elétrons injetados no poço quântico sob polarização de 45° pode levar à formação *spin gratings* devido ao espaçamento da ordem de alguns nanômetros destas entidades. Calculamos ainda o *shift* no vetor de onda de elétrons injetados no canal semicondutor do transistor Datta-Das formado por redes wurtzita.

Palavras-chave: *Semicondutores. Spintrônica. Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Modelo de Kane 8×8 .*

Wurtzita.

ABSTRACT

PIRES, D. P. 8×8 **Kane model for the electronic structure of wurtzites**. 2013. 265 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2013.

The spin-orbit interaction has played a crucial role in the development of low-dimensional semiconductor devices. In recent results addressing the 8×8 Kane model for cubic systems, particularly zincblende lattices, effective hamiltonians for the conduction band are calculated in a semi-analytical way. By folding down the Kane hamiltonian, the spinor components in the conduction band are isolated, resulting in an equation having the energy in denominators. Through a linearization process, controlled by a power expansion in the inverse of the energy gap, the energy is removed from the denominators and an effective hamiltonian is obtained. In a zincblende system, terms dependent on spin only appear in the effective hamiltonian of second order in the inverse of the energy gap of a heterostructure [PRL 99, 076603 (2007); PRB 78, 155313 (2008)]. In this master's thesis we apply this semi-analytical procedure to generate effective hamiltonians for the conduction band of wurtzite systems. Using the symmetries of the hexagonal lattice, the 8×8 Kane model is reviewed by taking into account all couplings mediated by the linear momentum and spin angular momentum. We show that exists an unified treatment for the Kane model of zincblende and wurtzite systems, which can be very useful in studies with nanowhiskers. We have found a first-order effective hamiltonian having terms dependent on spin even in the bulk case. One of these spin-dependent terms is the helicity operator. The spin-orbit interaction only appears in the second order expansion. Considering the first order hamiltonian, we have calculated the *Zitterbewegung* effect and discussed the Datta-Das transistor. We have found that only the spin operators exhibit the *Zitterbewegung* effect. The linear dependence with time shown by the position operators make of the spin operators harmonic fields, which form spin gratings similar to those found in zincblende heterostructures (persistent spin helix). We have also included a radiation field and calculated the (direct) optical transitions assisted by spin. We have found that the transition rates are harmonic functions of the incidence angle.

Keywords: *Semiconductors. Spintronics. $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method. 8×8 Kane model. Wurtzita.*

SUMÁRIO

1	Introdução	15
1.1	Semicondutores e a interação spin-órbita	15
1.2	Objetivos e conteúdo	21
2	O modelo de Kane para wurtzitas	25
2.1	O método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	26
2.2	Sobre o uso de simetrias e o modelo de Kane	30
2.2.1	Breve visão do sistema cristalino hexagonal	30
2.2.2	As simetrias do semicondutor de rede wurtzita	32
2.3	Elementos de matriz da interação cinética	42
2.4	Elementos de matriz da interação spin-órbita	46
2.4.1	A parametrização quase-cúbica	51
2.4.2	A parametrização cúbica	55
2.4.3	O grupo duplo	57
2.5	A matriz de Kane com oito bandas	61
2.6	A matriz de Kane em heteroestruturas	68
2.7	A comparação com Chuang & Chang	71
3	Equações efetivas	75
3.1	O <i>folding down</i>	75
3.2	O hamiltoniano efetivo em primeira ordem	81
3.2.1	Heteroestrutura	81
3.2.2	Monoestrutura	87

3.3	Renormalização	91
4	Estrutura eletrônica da banda de condução	95
4.1	O hamiltoniano efetivo na base do operador helicidade	96
4.2	Heteroestruturas	99
4.2.1	Uma subbanda	105
4.2.2	Duas subbandas	110
4.3	Monoestruturas	120
5	Diagonalização semi-analítica da matriz de Kane na fase <i>bulk</i>	131
5.1	A diagonalização do hamiltoniano de Kane	132
5.2	A estrutura de bandas do InAs	139
6	Transições ópticas	147
6.1	A interação elétron-fóton e o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	148
6.2	A equação efetiva com o campo de radiação	151
6.3	A aproximação de dipolo elétrico	160
6.4	Heteroestruturas	165
6.4.1	Uma subbanda	165
6.4.2	Duas subbandas	170
6.5	Monoestruturas	181
7	Aplicações	191
7.1	Grades de difração por spin	192
7.1.1	Schrödinger, Dirac e o efeito <i>Zitterbewegung</i>	192
7.1.2	O efeito <i>Zitterbewegung</i> na wurtzita	194
7.2	O transistor Datta-Das	204
7.2.1	O transistor de efeito de campo por spin	204
7.2.2	O transistor Datta-Das na wurtzita	205
8	Conclusões e perspectivas	213

REFERÊNCIAS	219
Apêndice A Digressões sobre teoria de grupos	231
A.1 Regras de seleção	231
A.2 A ação dos elementos de simetria do grupo C_{6v}	234
Apêndice B Propriedades matriciais	237
B.1 A álgebra das matrizes $\mathbb{M}_l$	237
B.2 Os produtos $\mathbb{M}_l \mathbb{M}_l^\dagger$	239
B.3 A decomposição singular da matriz H_v	241
B.4 A ação das matrizes $\mathbb{M}_i$ e $\mathbb{M}_j$ no bloco H_v	243
Apêndice C Transformações de similaridade	245
C.1 Para uma matriz de ordem dois	245
C.2 Para o operador helicidade e o potencial vetor	246
Apêndice D Poço simétrico com duas subbandas	249
D.1 A simplificação nos vetores de estado	249
D.2 O termo perturbativo	251
D.3 A álgebra dos coeficientes $\mathcal{Q}$, $\mathcal{S}$ e $\mathcal{T}$	254
Apêndice E Produtos matriciais com o acoplamento mínimo	257
Apêndice F Evolução temporal do operador posição	263

Capítulo 1

Introdução

Neste capítulo inicial do trabalho, vamos discutir brevemente o estado da arte que envolve o estudo da interação spin-órbita em semicondutores de baixa dimensionalidade na física da matéria condensada. Adotando como ponto de partida semicondutores de rede zincblende, o texto apresentará resultados importantes reportados em referências tradicionais da área, seja do ponto de vista teórico ou experimental. Em especial, conduziremos a atenção para o caso de semicondutores de estrutura hexagonal cristalizados na fase wurzita, o ambiente do nosso estudo. Ao final, pontuaremos a divisão deste trabalho comentando brevemente sobre os capítulos da dissertação.

1.1 Semicondutores e a interação spin-órbita

A física de semicondutores de baixa dimensionalidade nunca esteve tão em alta quanto nos últimos anos. De modo geral, trabalhos recentes apontam que os efeitos da interação spin-órbita nestes materiais desempenham um papel preponderante no desenvolvimento de novos dispositivos ópticos e eletrônicos (1,2). Neste âmbito, a indústria de semicondutores tem investido cifras cada vez mais altas tanto na formação de recursos humanos voltada à pesquisa científica básica, quanto na procura de novos materiais altamente atrativos do

ponto de vista tecnológico e comercial.

O campo multidisciplinar que lida com fenômenos dependentes de spin na física da matéria condensada é conhecido como *spintrônica*, expressão cunhada a partir da idéia de uma nova eletrônica integralmente alicerçada no transporte de spin. O cerne da spintrônica está na compreensão da interação entre o spin eletrônico e o meio onde está imerso, incluindo desde os efeitos do potencial cristalino periódico devido ao arranjo de átomos em um sólido até a presença de outros elétrons (3). As principais linhas de pesquisa na área tentam responder ainda a uma série de perguntas altamente relevantes e particularmente inquietantes como, por exemplo, qual a forma mais eficiente de se polarizar um sistema de spins e por quanto tempo este efeito se mantém. Além disso, lida com dificuldades técnicas envolvendo a injeção, transporte, manipulação e controle de spin (4).

A consagração de todo o poder e importância da spintrônica veio com a laureação de Peter Grünberg e Albert Fert com o Prêmio Nobel de Física em 2007 por seus trabalhos acerca da magneto-resistência gigante, efeito que permitiu a construção das chamadas “válvulas spintrônicas” usadas desde meados da década de 90 na indústria de gravação e leitura de dados em meios magnéticos. Dentre as novas tecnologias que o entendimento deste efeito permitiu desenvolver, destaca-se sem dúvida a produção de discos rígidos bem mais compactos e eficientes. Os primeiros trabalhos envolvendo a magneto-resistência gigante remetem ao ano de 1988, contando inclusive com a participação de pesquisadores brasileiros (5). Dos dispositivos spintrônicos mais promissores atualmente, destaca-se o transistor de efeito de campo de spin (*Spin Field Effect Transistor* ou Spin-FET) proposto por Datta-Das (6). Muito embora este transistor tenha sido proposto no início da década de 90, só foi reproduzido experimentalmente quase 20 anos depois (7) e ainda é centro de muitas discussões.

A pesquisa e desenvolvimento de novos materiais semicondutores nem sempre se refere a estruturas com apenas um único constituinte, ou seja, não está limitada a semicondutores em *bulk** embora se tenha em mente sua devida relevância. Em geral, este desenvolvimento está por vezes atrelado ao arranjo de materiais com diferentes proprie-

*Palavra vinda do inglês “volume”, é usada comumente para se referir a estruturas semicondutoras puras. É comum também o uso do termo “monoestruturas” referente a estes materiais.

dades físicas como, por exemplo, bandas de energia, concentração de portadores e número de dopantes (8). É neste contexto que surgem as heteroestruturas. Dentre o conjunto de todas as heteroestruturas semicondutoras[†], o poço quântico se destaca como aquela mais simples. De maneira geral, o poço quântico pode ser entendido como um arranjo sequencial de no mínimo três camadas semicondutoras crescidas de tal forma a manter um alinhamento paralelo entre suas interfaces. O material central possui gap de energia bem menor quando comparado àquele dos semicondutores nas extremidades da junção. Na prática, a interação na qual os elétrons estarão sujeitos na região central tem o perfil do potencial que descreve um poço quântico usual. Nesta estrutura formam-se então níveis de estados ligados cujo número e espaçamento dependem intimamente da geometria do poço através de sua altura e largura.

Há um recente interesse por estruturas com grau de complexidade um pouco maior como é o caso do *politipismo*, uma série de junções de estruturas semicondutoras com propriedades de simetria diferentes (9,10). A situação que tem atraído atenção é aquela formada por redes zincblende (*Z*) e wurtzita (*W*), ou seja, $WZWZWZ\dots$. Conforme mostraremos no capítulo 2, a base vinda da diagonalização da matriz que descreve a interação spin-órbita na rede wurtzita permite uma descrição universal tanto do sistema hexagonal quanto do cúbico[‡], resultado que pode ser relevante na descrição do politipismo.

Mas, afinal, como surge o acoplamento spin-órbita nesta história toda? Bem, se pensarmos num sólido, além dos efeitos da interação entre os próprios elétrons, estes se encontram sob ação do potencial periódico da rede cristalina $V(\mathbf{r})$. A forma mais correta e formal de tratar este problema é seguir os preceitos da mecânica quântica relativística (11–13) e utilizar a equação de Dirac para calcular o espectro e os autoestados dos elétrons, agora descritos por espinores (14,15). Entretanto, se estivermos interessados num regime de aproximação de baixas velocidades, uma expansão da equação de Dirac em ordens de potências do inverso da velocidade da luz ($1/c$) fornece como correção mais

[†]As heteroestruturas mais tradicionais incluem o poço, o fio e o ponto quântico.

[‡]É importante deixar claro que nesta dissertação sempre que nos referirmos a “sistemas hexagonais” teremos a rede wurtzita em mente. Analogamente, sempre que citarmos a expressão “sistemas cúbicos” estaremos falando de semicondutores de rede zincblende.

baixa em ordem de $1/c^2$ o hamiltoniano (16)

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{p}, \quad (1.1)$$

onde m_0 é a massa e $\mathbf{p}$ o momentum linear do elétron. Além disso, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ representa um vetor cujas componentes são dadas pelas matrizes de Pauli (17). Este hamiltoniano descreve a chamada interação spin-órbita. Recomendamos ao leitor interessado o livro de Sin-Itiro Tomonaga (18) acerca de sua fantástica explanação sobre os fundamentos do spin do elétron e do acoplamento spin-órbita na mecânica quântica, em particular como este grau de liberdade está intimamente ligado à equação relativística de Dirac. Além disso, o artigo de Zawadzki (19) apresenta em detalhes a expansão em ordens de $1/c$ que comentamos.

Se a interação spin-órbita é de crucial importância nas energias de átomos ou mesmo moléculas onde o acoplamento entre elétron e próton é sobressalente, tão fundamental quanto é ainda sua estreita ligação com a relação de dispersão de alguns materiais semicondutores onde o elétron interage com o potencial periódico da rede cristalina. Em geral, considerando a presença do acoplamento spin-órbita, a estrutura de bandas do sólido se desdobra em outros níveis de energia frente a multiplicidade dos dois estados de spin que o elétron dispõe.

A rede vazia, livre de átomos ou íons, representa a situação de maior simetria possível que a estrutura cristalina pode apresentar (20). Entretanto, esta simetria diminui gradativamente frente a inclusão de átomos ou grupos de átomos nos pontos da rede. E se a rede tem átomos diferentes em seus pontos, as simetrias são ainda mais restritivas. Exemplo disso é a simetria de inversão espacial. A rede com átomos distintos em geral não tem este elemento de simetria no conjunto de transformações no qual o cristal é invariante. Este é o caso, por exemplo, de semicondutores de rede zinblende e também wurtzita.

É sabido que na presença de assimetria de inversão o acoplamento spin-órbita traz à tona uma interação que é responsável pela quebra na degenerescência das energias na banda de valência no centro da zona de Brillouin em sistemas cúbicos. Esta interação, caracterizada pela constante de acoplamento β , foi primeiro reportada por Dresselhaus

(21) e está presente tanto na heteroestrutura quanto no semicondutor em *bulk*. Dentre as diversas formas de se induzir a assimetria de inversão na heteroestrutura, a mais simples está na introdução de campos externos que interferem diretamente no potencial estrutural que caracteriza o poço quântico. Esta interferência origina uma nova assimetria, conhecida como estrutural, responsável pela emergência da chamada interação spin-órbita de Rashba (22, 23) e caracterizada pela constante de acoplamento α . Em geral, uma vez que este acoplamento é também função de campos externos, aplicando uma diferença de potencial na interface das junções semicondutoras do poço temos pleno controle da assimetria de inversão estrutural e da intensidade deste acoplamento spin-órbita nestas estruturas.

Recentemente foi proposto um novo tipo de interação spin-órbita em poços quânticos com duas subbandas (24) no caso cúbico. Este novo acoplamento, embora similar ao de Rashba, não é devido a assimetria de inversão no potencial estrutural do poço mas sim da diferença de paridade dos estados confinados nesta estrutura.

Agora que discorreremos acerca do caso cúbico, vamos falar um pouco sobre o andamento da pesquisa científica em torno da wurtzita. Muito embora exista notadamente um número de trabalhos e atenção realmente expressivos voltados à interação spin-órbita em sistemas cúbicos, a rede wurtzita também tem se caracterizado como um bom laboratório para a pesquisa científica básica e o desenvolvimento de novas tecnologias que têm o acoplamento spin-órbita como agente central (25). Em geral, o estudo da estrutura de bandas de semicondutores de rede wurtzita estabelece bases fundamentais no entendimento das propriedades ópticas e eletrônicas que baseiam a indústria de dispositivos ópticos e eletrônicos como o nitreto de gálio (GaN). Como exemplo, a verificação experimental de diodos emissores de luz usando junções semicondutoras de rede wurtzita do tipo $GaN/Al_xGa_{1-x}N$ (26) motivou uma série de trabalhos teóricos (27) e experimentais (28) publicados na década de 90. Além disso, foi reportado recentemente que excitações ópticas através de luz circularmente polarizada no gás bidimensional de elétrons confinado em poços quânticos de heteroestruturas semicondutoras induz a geração de uma corrente cuja intensidade e direção dependem do ângulo de polarização do feixe de luz incidente (29).

O conhecimento das propriedades de simetria do semicondutor pode eventualmente diminuir as dificuldades matemáticas e reduzir a necessidade de grandes recursos computacionais no cálculo de sua estrutura de bandas (30). Na prescrição do uso de resultados da teoria dos grupos para descrever o cristal e, portanto, a estrutura de bandas de um semicondutor de rede cúbica, se encaixam os trabalhos de Kane (31–34). Nestes artigos o autor dispõe do conhecimento do grupo de simetria do cristal de rede zinblende para calcular sua estrutura de bandas, em particular dando ênfase à presença da interação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ no hamiltoniano que descreve o sistema. O mesmo acontece na referência (35). No capítulo 2 entraremos em detalhes sobre esta interação e como ela se relaciona ao nosso problema de estudo. Um dos trabalhos pioneiros no estudo das simetrias na estrutura de bandas da rede wurtzita remonta a um artigo de Rashba publicado em 1957 (36). Neste artigo, mesmo não levando em conta o acoplamento spin-órbita, o autor descreve as representações irredutíveis do grupo espacial C_{6v}^4 para todos os pontos especiais do vetor de onda $\mathbf{k}$ na primeira zona de Brillouin do cristal de wurtzita. Além disso, através da simetria de reversão temporal desenvolve uma técnica que permite encontrar os pontos de derivada nula e a forma das superfícies de energia na rede.

Em um artigo que estende os resultados de Suzuki e Uenoyama (37) acerca dos acoplamentos via o operador momentum linear entre as bandas de condução e valência no GaN, Chuang e Chang (38) calculam a matriz de Kane 8×8 para semicondutores de rede wurtzita via o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ truncando as autofunções de Luttinger-Kohn (39) numa base de oito autovetores onde o spin é incluído na forma dos estados $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ do operador σ_z . Levando em conta ainda o efeito de *strain*, neste trabalho os autores fornecem expressões analíticas para as massas efetivas calculadas no centro da zona de Brillouin e para os novos elementos de matriz vindos do acoplamento mediado pelo operador momentum linear entre a banda de condução e o fundo da banda de valência. A presença dos efeitos de *strain* no hamiltoniano de Kane não foi exclusividade deste trabalho, já que em 1974 Pikus e Bir (40) formularam o mesmo problema via a teoria dos invariantes.

1.2 Objetivos e conteúdo

Dentre os trabalhos recentes abordando o modelo de Kane para sistemas cúbicos, particularmente redes zincblende (41), hamiltonianos efetivos são calculados via uma técnica algébrica conhecida como *folding down* (42) seguida de um processo de linearização até segunda ordem no inverso do gap de energia com a devida correção no espinor da banda de condução (43). Motivados por estes estudos, o objetivo maior deste trabalho se concentra na descrição algébrica da estrutura eletrônica de semicondutores de rede wurtzita tendo como pano de fundo importantes resultados da teoria dos grupos. A partir das simetrias da rede hexagonal, formularemos o modelo de Kane 8×8 considerando todos os possíveis acoplamentos mediados pelos operadores momentum linear e angular de spin. Através de um modelo efetivo baseado na mesma expansão em ordens do inverso do gap de energia, determinaremos e resolveremos a equação que descreve o movimento de um elétron de condução em poços quânticos e em estruturas semicondutoras em *bulk*. Ademais, através destes resultados investigaremos propriedades ópticas do poço quântico e da monoestrutura na figura das taxas de transição relativas à promoção de um elétron de condução entre dois níveis de energia via a absorção de um fóton.

Esta dissertação está dividida em sete capítulos. No capítulo 2 descrevemos de forma sucinta o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e como ele está ligado a representação matricial do hamiltoniano de Kane. Em especial, apresentamos um panorama das simetrias de um semicondutor cristalizado na fase wurtzita ressaltando a importância do conhecimento destas propriedades no que se refere a estrutura de bandas do material. Calculamos ainda a projeção dos operadores que formam o hamiltoniano de Kane na base de autoestados da interação spin-órbita encontrando ao final a matriz de Kane 8×8 para um semicondutor de rede wurtzita na fase *bulk*.

No capítulo 3 determinamos a equação efetiva que descreve um elétron na banda de condução a partir do hamiltoniano de Kane 8×8 na parametrização quase-cúbica utilizando o chamado *folding down*, um método algébrico exato que consiste em desacoplar

os espaços vetoriais associados aos espinores das bandas de condução e valência. Uma vez que a equação de Schrödinger associada ao hamiltoniano efetivo é não-linear nas energias do sistema e não reflete portanto um problema de autovalor, estabelecemos a linearização dos denominadores de energia envolvidos no espírito das referências (42,43), cuja ordem de aproximação será dada em termos do inverso do gap de energia do material semiconductor. Um dos resultados importantes deste capítulo está na presença da interação dependente em spin na figura do operador helicidade (no plano) já na linearização em primeira ordem no inverso do gap de energia, um comportamento não observado no caso zincblende (44).

No intuito de estudar as soluções da equação efetiva obtida na linearização em primeira ordem no âmbito da heteroestrutura, no capítulo 4 apresentamos um modelo de subbandas vindo da projeção do hamiltoniano H na base de estados formada pelo produto entre os autoestados de spin do operador σ_z e as autofunções relativas ao movimento orbital do elétron. Truncando o número de estados da base, discutimos em detalhes os modelos de uma e duas subbandas para o poço quântico e encerramos o capítulo analisando os resultados que envolvem a monoestrutura.

Restringindo-nos à parametrização cúbica, no capítulo 5 encontramos uma forma fechada para os coeficientes do polinômio característico da matriz de Kane 8×8 obtida no capítulo 2 para a monoestrutura semicondutora. Muito embora este polinômio característico não exiba fatoração imediata, determinamos numericamente suas raízes e construímos a estrutura de bandas do antimoneto de índio (InAs) em torno de $k = 0$. No que se refere a banda de condução do semiconductor na fase *bulk*, comparamos a solução numérica do polinômio característico da matriz de Kane 8×8 à linearização nos denominadores de energia adotada na seção (4.3) onde a relação de dispersão da banda de condução foi calculada analiticamente.

No capítulo 6 reformulamos o modelo de Kane 8×8 desenvolvido no capítulo 3 para incluir os efeitos da interação entre o elétron de condução e o campo de radiação na figura do acoplamento mínimo. Como resultado, encontramos um modelo efetivo que descreve a interação elétron-fóton em primeira ordem de aproximação no inverso do gap de energia tanto para uma heteroestrutura quanto para um material semiconductor na fase *bulk*. Ao

final, calculamos e analisamos as taxas de transição óptica para os modelos de uma e duas subbandas além, é claro, da monoestrutura.

Por fim, o capítulo 7 discute duas aplicações a partir do modelo de uma subbanda outrora estudado no capítulo 4. A primeira delas diz respeito ao *Zitterbewegung* (45), efeito com origens puramente relativísticas no qual o movimento do elétron exibe um comportamento oscilatório. No intuito de verificar este efeito no movimento de elétrons de condução confinados no poço quântico com uma subbanda, calcularemos a evolução temporal dos operadores posição e de spin. A segunda aplicação se refere ao transistor Datta-Das (6). Este dispositivo, que se fundamenta no mecanismo de precessão de spin, atrai ainda hoje grande parte de esforços científicos que permeiam a spintrônica (7). Admitindo o canal do transistor formado por uma heteroestrutura semicondutora de rede wurtzita, determinaremos o *shift* no vetor de onda de elétrons injetados por um contato ferromagnético no gás bidimensional confinado no poço quântico com uma subbanda.

No capítulo 8 apresentamos as conclusões e perspectivas deste trabalho. Os apêndices A–F complementam os cálculos e argumentos fornecidos em cada capítulo da dissertação.

Capítulo 2

O modelo de Kane para wurtzitas

Dentre as diversas técnicas utilizadas para determinar a estrutura eletrônica de materiais semicondutores, o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ se destaca não apenas por ser capaz de apresentar resultados analíticos que requerem um pequeno número de parâmetros experimentais, mas também por permitir uma série de aproximações sobre as quais podemos ter pleno controle (46). Em geral, o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ permite calcular o espectro de elétrons e buracos conhecendo-se gaps de energia e alguns poucos elementos de matriz obtidos a partir de experimentos ópticos (47).

O método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ pode ser usado para calcular a estrutura de bandas da primeira zona de Brillouin conhecendo a estrutura de bandas calculada em um único ponto $\mathbf{k}_0$. Na maioria das vezes, esta escolha é feita privilegiando o ponto de maior simetria dentro da zona de Brillouin, em particular o ponto Γ , onde $\mathbf{k}_0 = 0$. Este é o caso, por exemplo, de semicondutores de *gap direto*, onde o topo da banda de valência e o fundo da banda de condução estão alinhados no ponto $\mathbf{k}_0 = 0$.

Fatores como este atribuem grande relevância ao uso de simetrias na descrição do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Exemplo disso é que o número de parâmetros independentes pode ser reduzido explorando as propriedades de simetria das representações irredutíveis associadas a cada banda de energia ou conhecendo o grupo pontual que descreve a cela unitária (31).

Na seção 2.1 descreveremos de forma sucinta o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e como ele está ligado a representação matricial do hamiltoniano de Kane. Na seção 2.2 apresentaremos uma rápida visão das simetrias de um semicondutor cristalizado na fase wurtzita. Em particular,

ressaltaremos a importância do conhecimento destas simetrias para o desenvolvimento deste trabalho. Por fim, nas seções 2.3, 2.4 e 2.5 mostraremos como calcular a projeção dos operadores que formam o hamiltoniano de Kane na base de autoestados da interação spin-órbita. Ao final do capítulo, teremos em mãos a matriz de Kane 8×8 para um semicondutor de rede wurtzita na fase *bulk*.

2.1 O método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

Um elétron em movimento num sólido está sujeito ao potencial dos íons que compõem sua rede cristalina. Se considerarmos uma rede ideal, livre de impurezas ou qualquer tipo de imperfeição, esta será a única fonte de interação na qual o elétron se encontra. De maneira geral, o movimento de um elétron de massa m_0 na presença de um potencial $V(\mathbf{r})$ é descrito pela equação de Dirac (13),

$$\left[m_0 c^2 \alpha_0 + c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

onde $\Psi(\mathbf{r})$ representa um espinor de quatro componentes, e $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ define um vetor cujas componentes α_j ($j = 0, 1, 2, 3$) são as matrizes de Dirac (17) que satisfazem as relações de anticomutação

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij} \mathbf{1}_{4 \times 4}. \quad (2.2)$$

Se estamos interessados numa escala de energias menores que a energia de repouso, ou seja, $E \ll m_0 c^2$, a equação de Dirac pode ser expandida numa série de potências cujo parâmetro de ordem é dado pelo termo $1/c$ (19). Dentre as correções de mais baixa ordem de aproximação, se destaca o chamado hamiltoniano de Pauli

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{p}, \quad (2.3)$$

onde $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ representa um vetor cujas componentes são dadas em termos das matrizes de Pauli,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Em linhas gerais, este hamiltoniano descreve o movimento do elétron na presença de um potencial $V(\mathbf{r})$ sujeito ainda a contribuição da interação spin-órbita. O leitor pode perceber que não estamos levando em conta as correções de Darwin e da massa relativística (19, 48), muito embora estes termos possuam a mesma ordem em $1/c^2$ que o termo de spin-órbita.

O hamiltoniano H é invariante por translações espaciais associadas a vetores da rede de Bravais devido a periodicidade do potencial $V(\mathbf{r})$. A *cela unitária* é a menor entidade que guarda as simetrias do cristal, em princípio infinito. Dada a simetria translacional perfeita do cristal, o *Teorema de Bloch* (49) afirma que os autoestados do hamiltoniano são dados por

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

onde $\mathbf{k}$ representa um vetor da rede recíproca que varia dentro da primeira zona de Brillouin, $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ são funções que possuem a mesma periodicidade do potencial cristalino e n é um número inteiro que classifica as bandas de energia do sólido. Denotaremos as energias correspondentes a cada um dos estados do hamiltoniano por $\varepsilon_{n,\mathbf{k}}$. A periodicidade herdada pelos autoestados de Bloch através do potencial que descreve a rede cristalina promove uma redução do problema, ou seja, ao invés de considerarmos todo o volume do cristal é suficiente resolver a equação de Pauli apenas dentro da cela unitária com as devidas condições de contorno.

Para que possamos utilizar o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, será mais interessante atuar o hamiltoniano (2.3) nos estados (2.5) determinando uma equação efetiva que descreva a parte periódica da função de Bloch. Recorrendo aos simples resultados algébricos

$$\mathbf{p}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{p}^2\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (\mathbf{p}^2 + 2\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \hbar^2 k^2) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.6)$$

a equação de autovalor para a parte periódica da função de Bloch pode ser escrita na forma

$$H u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left(\varepsilon_{n,\mathbf{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad (2.7)$$

onde H é conhecido como hamiltoniano de Kane (31,32,46),

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} , \quad (2.8)$$

e

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r}) . \quad (2.9)$$

O termo $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}$ no hamiltoniano de Kane claramente atribui o nome ao método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ na ausência da interação spin-órbita indicada em (2.9), sendo identicamente nulo para o caso em que $\mathbf{k} = 0$.

A partir destes resultados, estamos agora em condições de discutir a essência do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Para um dado inteiro n e uma escolha do vetor de Bloch, por exemplo $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, o conjunto das funções $u_{n,\mathbf{k}_0}$ forma uma base ortonormal completa no espaço vetorial das funções periódicas na cela unitária. Neste sentido, podemos expandir qualquer função $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ para um vetor $\mathbf{k}$ arbitrário em termos de uma combinação dos autoestados desta base,

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^N a_{nl}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) u_{l,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) . \quad (2.10)$$

Uma vez que nosso estudo compreende apenas semicondutores de gap direto, nada mais natural que tomar esta expansão em torno do ponto de maior simetria da cela unitária, ou seja, o ponto Γ , onde $\mathbf{k}_0 = 0$. Desta forma, denotando $a_{nl}(\mathbf{k}, 0) = a_{nl}(\mathbf{k})$, temos

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^N a_{nl}(\mathbf{k}) u_{l,0}(\mathbf{r}) . \quad (2.11)$$

Um aspecto importante a ser ressaltado é que, via de regra, esta expansão é truncada de modo a considerar um número finito N de autofunções $u_{l,0}(\mathbf{r})$, conhecidas também como funções de Luttinger-Kohn (39). Uma particular escolha desta base será discutida mais adiante quando tratarmos do modelo de Kane. Outra característica está no fato de que

$u_{l,0}(\mathbf{r})$ é autoestado de H com autovalor $\varepsilon_{l,0}$, ou seja,

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{p} \right) u_{l,0}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{l,0} u_{l,0}(\mathbf{r}) . \quad (2.12)$$

Para finalizar, vamos substituir (2.11) na equação (2.7) e determinar uma equação que nos permita calcular cada um dos coeficientes $a_{nl}(\mathbf{k})$ da expansão, a saber,

$$\sum_{l=1}^N a_{nl}(\mathbf{k}) \left[\left(\varepsilon_{l,0} - \varepsilon_{n,\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} \right] u_{l,0}(\mathbf{r}) = 0 . \quad (2.13)$$

Multiplicando esta equação pela função $u_{s,0}^*(\mathbf{r})$ e integrando sobre todo o volume da cela unitária, encontramos a representação da equação (2.7) na base de autoestados do próprio hamiltoniano H dado em (2.3),

$$\sum_{l=1}^N \left[\left(\varepsilon_{l,0} - \varepsilon_{n,\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{s,l} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \langle s|\boldsymbol{\pi}|l \rangle \right] a_{nl}(\mathbf{k}) = 0 , \quad (2.14)$$

onde $\langle \mathbf{r}|l \rangle = u_{l,0}(\mathbf{r})$, exploramos a ortonormalidade dos elementos da base e definimos o seguinte elemento de matriz

$$\langle s|\boldsymbol{\pi}|l \rangle = \int d^3\mathbf{r} u_{s,0}^*(\mathbf{r}) \boldsymbol{\pi} u_{l,0}(\mathbf{r}) . \quad (2.15)$$

A equação (2.14) pode ser reescrita na forma matricial e tratada como um simples problema de autovalor, determinando as energias $\varepsilon_{n,\mathbf{k}}$ e os coeficientes da expansão para qualquer ponto $\mathbf{k}$ em torno de $\mathbf{k}_0 = 0$. Os resultados são dados em função de alguns parâmetros que podem ser obtidos através de experimentos, caracterizando o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ como um modelo semi-analítico.

O resultado que acabamos de determinar vale, em primeira instância, para um material semiconductor em *bulk*. Como estamos interessados também em semicondutores que se cristalizam na fase wurtzita, através de uma discussão acerca das propriedades de simetria desta estrutura faremos a devida escolha para a base de funções de Luttinger-Kohn e descreveremos o modelo de Kane.

2.2 Sobre o uso de simetrias e o modelo de Kane

2.2.1 Breve visão do sistema cristalino hexagonal

Nesta seção apresentaremos uma visão introdutória sobre conceitos que envolvem a descrição de uma rede cristalina hexagonal em termos da teoria dos grupos (finitos). Estas informações podem ser encontradas em vários livros textos sobre o assunto de maneira mais profunda (20, 40). Naturalmente, o leitor familiarizado com estas idéias pode suprimir esta seção e continuar a leitura sem nenhum prejuízo ao entendimento das demais.

Um cristal é concebido pelo arranjo espacial de átomos numa rede também chamada de rede vazia. Em geral, a rede vazia é caracterizada por um conjunto de três vetores não coplanares chamados vetores de translação. Particularmente no caso da rede hexagonal, estes vetores são dados por

$$\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0) , \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (-1, \sqrt{3}, 0) , \quad \mathbf{a}_3 = (0, 0, c) , \quad (2.16)$$

onde a e c definem as constantes de rede do material semiconductor. Observe que os vetores $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ têm o mesmo comprimento a e formam um ângulo de 120° entre si. O vetor $\mathbf{a}_3$ tem módulo igual a c e é ortogonal aos demais. Qualquer ponto da rede vazia pode ser escrito como uma combinação linear destes vetores. O conjunto de rotações, próprias ou impróprias, no qual um vetor da rede vazia é invariante forma o grupo pontual holossimétrico. É sabido, por exemplo, que o grupo pontual holossimétrico do sistema cristalino hexagonal é o D_{6h} (20).

A conjunção de todas as simetrias nas quais o cristal é invariante define o grupo espacial. Devido a presença dos átomos, a rede pode apresentar uma simetria ligeiramente menor que aquela exibida na ausência destas entidades. O grupo de simetria da rede na presença dos átomos é conhecido como grupo pontual isogonal. O grupo D_{6h} , além das rotações e reflexões usuais, dispõe ainda da simetria de inversão. Dentre seus subgrupos, está o grupo pontual isogonal C_{6v} .

Grupos espaciais podem ser divididos em simórficos e não-simórficos. Enquanto o primeiro exibe apenas rotações próprias e impróprias, o segundo acopla rotações e reflexões a deslocamentos por vetores não-primitivos da rede. Este é o caso do grupo espacial de um cristal de rede wurtzita, designado pelo símbolo C_{6v}^4 (40).

Em particular, a rede recíproca do sistema cristalino hexagonal é novamente hexagonal e tem vetores primitivos

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0 \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}, 0 \right), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{c} (0, 0, 1). \quad (2.17)$$

A rede recíproca e a rede espacial têm os mesmos grupos pontuais de simetria (50). Segundo esta prescrição, dois vetores $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$ no espaço recíproco ligados por um vetor de translação formado pela combinação linear dos vetores em (2.17) são equivalentes. Se nos limitarmos apenas à primeira zona de Brillouin, os pontos $\mathbf{k}$ pertencentes a esta região recebem dois tipos de classificação, a saber, pontos gerais ou especiais. Diferentemente dos especiais, os pontos gerais não exibem qualquer simetria. Os pontos especiais, por sua vez, se dividem ainda em pontos e linhas de simetria. A classificação destas quantidades segue uma notação padrão na física do estado sólido através de símbolos como Γ , A , H , L , M e K . É o que acontece, por exemplo, com a primeira zona de Brillouin de um cristal

Figura 2.1 – Primeira zona de Brillouin para um cristal de rede recíproca hexagonal. Na figura estão representados os pontos especiais de mais alta simetria da rede, em particular os pontos Γ , A , H , L , M e K . Figura extraída do site <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/BN/bandstr.html>

de rede wurtzita, cujo ponto Γ exibe a maior simetria da rede (47). De todas as rotações no grupo pontual holossimétrico, aquelas nas quais o vetor de onda $\mathbf{k}$ da rede recíproca é

invariante definem o chamado grupo de simetria do vetor de onda.

Muito embora tenha um número infinito de elementos, sabe-se que o grupo espacial gera tantas funções linearmente independentes quantos elementos há em seu grupo pontual isogonal (20). De todas as operações no grupo pontual isogonal, aquelas rotações β nas quais o vetor de onda $\mathbf{k}$ do espaço recíproco é invariante, ou seja, $\beta\mathbf{k} = \mathbf{k}$, formam um subgrupo pontual chamado *little co-group*. Este subgrupo é dado em termos da intersecção do grupo do vetor de onda $\mathbf{k}$ e do grupo pontual isogonal. Se estas rotações são combinadas com vetores de translação da rede espacial, então os elementos de simetria resultantes formam um grupo espacial chamado *little group* ou grupo do vetor de onda $\mathbf{k}$. Em particular, o *little group* do vetor de onda $\mathbf{k}$ no ponto Γ na zona de Brillouin é sempre igual ao grupo pontual isogonal do cristal. No que se refere ao sistema hexagonal, o *little group* ou grupo do vetor de onda é dado pelo grupo pontual C_{6v} (36).

2.2.2 As simetrias do semicondutor de rede wurtzita

Um cristal semicondutor de rede wurtzita pode ser entendido como uma superposição de quatro redes hexagonais interpenetrantes (30). A base do cristal é composta por quatro átomos, em geral separados aos pares por duas espécies químicas distintas, digamos, A e B . Assim, os pontos de duas das redes hexagonais são ocupados por átomos da espécie química A e as outras duas por átomos do tipo B . Como exemplo prático, na figura 2.2 mostramos um arranjo esquemático da rede hexagonal tridimensional do nitreto de gálio (GaN), cujos vértices são ocupados por átomos de gálio (Ga) e nitrogênio (N). Um átomo de gálio (nitrogênio) tem como primeiros vizinhos na rede quatro átomos de nitrogênio (gálio). Na direção z ($[001]$), a rede tem comprimento dado pelo parâmetro de rede c . Classificando os átomos na rede por Ga_1 , Ga_2 , N_1 e N_2 , uma vez que um átomo N_2 se encontra em um dado ponto da rede (a origem das coordenadas, por simplicidade), as

Figura 2.2 – Arranjo esquemático da rede hexagonal tridimensional do nitreto de gálio (GaN). A figura 2.2(a) indica que os vértices da rede são ocupados por átomos de gálio (Ga) e nitrogênio (N). Os átomos de nitrogênio são aqui representados pelas esferas pequenas em azul, enquanto os átomos de gálio são caracterizados pelas esferas grandes em vermelho. Por outro lado, a figura 2.2(b) mostra a vista superficial da rede tridimensional do GaN indicando ainda a disposição dos eixos cartesianos x e y . Analisando a figura, é possível perceber a sobreposição de átomos de nitrogênio (azul) em relação aos átomos de gálio (vermelho). As linhas tracejadas indicam as ligações químicas entre os átomos na rede. Figura extraída e adaptada da referência (51).

posições dos demais são obtidas através dos vetores (46)

$$\mathbf{r}_{\text{Ga}_1} = \left(0, 0, \frac{c}{2} + \zeta c\right), \quad \mathbf{r}_{\text{N}_1} = \left(\frac{a}{2}, -\frac{a}{2\sqrt{3}}, \frac{c}{2}\right), \quad \mathbf{r}_{\text{Ga}_2} = \left(\frac{a}{2}, -\frac{a}{2\sqrt{3}}, \zeta c\right). \quad (2.18)$$

O parâmetro ζ está comumente ligado à razão das constantes de rede a e c ,

$$\zeta = \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \left(\frac{a}{c}\right)^2. \quad (2.19)$$

Se, por exemplo, os quatro primeiros vizinhos de um átomo nitrogênio (esferas pequenas em azul na figura 2.2) na rede estão situados nos vértices de um tetraedro perfeito que circunda este átomo simetricamente, então $\zeta = 3/8$ e vale a relação (47)

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633. \quad (2.20)$$

Na tabela 2.1 estão relacionados alguns semicondutores que se cristalizam na fase wurtzita e o respectivo valor da razão c/a entre as constantes de rede (46). Note como os valores da razão c/a são próximos entre os diferentes materiais.

Tabela 2.1 – Valores típicos da razão c/a entre as constantes de rede de materiais semicondutores com rede wurtzita.

	ZnS	CdS	CdSe	MgTe	AlN	GaN	InN
c/a	1.64	1.62	1.63	1.62	1.60	1.62	1.61

Analisando a rede, podemos determinar as simetrias da estrutura wurtzita. Vamos tomar como exemplo novamente a rede tridimensional do nitreto de gálio indicada na figura 2.2 onde, se $c/a = 1.62$, então $\zeta \approx 0.377$. A figura 2.3(a) apresenta a vista superficial desta rede tomando como referência o plano definido pelos átomos de gálio (vermelho) onde se encontra o átomo Ga_1 . O eixo de rotação z passa no centro do hexágono vazio dado nesta figura. Os átomos de nitrogênio (azul) estão no mesmo plano definido por N_1 como visto na figura 2.2. Este plano, por sua vez, encontra-se deslocado de ζc abaixo daquele definido pelos átomos de gálio (vermelho). Logo abaixo de um átomo de nitrogênio, a uma distância de $(1 - 2\zeta)c/2$, vem um átomo de gálio localizado no mesmo plano onde se encontra Ga_2 . Uma rotação de 60° em torno do eixo no centro do hexágono leva à figura 2.3(b). Se queremos reproduzir o cristal, esta rotação deve estar conectada com uma translação de $c/2$ paralela ao eixo z . Este elemento de simetria, uma rotação acompanhada de uma translação, representa a operação chamada rotação em parafuso (*screw rotation*). Paralelos ao eixo no centro do hexágono vazio passam seis

Figura 2.3 – Operações de simetria que deixam o cristal de wurtzita invariante. No detalhe, a visão superior da rede hexagonal que compõe a cela unitária. Logo abaixo de um átomo azul (vermelho), em um plano diferente, vem um átomo vermelho (azul). Uma rotação de 60° modifica a figura 2.3(a) para a figura 2.3(b). O cristal é reproduzido por uma translação de $c/2$ paralela ao eixo de rotação no centro do hexágono.

espelhos planos não-equivalentes, entre os quais três são planos de reflexão própria e três representam planos de reflexão unidos a translações de $c/2$ paralelamente ao eixo z (46). Esta operação, formada por uma reflexão seguida de uma translação paralela ao plano de reflexão, define a reflexão com deslizamento (*glide reflection*). Assim, o grupo espacial de um semicondutor de rede wurtzita é o C_{6v}^4 . O símbolo C_{6v}^4 segue a notação de Schoenflies, enquanto o mesmo grupo é definido pelo símbolo $P6_3mc$ na notação de Hermann-Mauguin.

Por dispor de operações de simetria que congregam rotações e reflexões por vezes anexadas a vetores de translação não-primitivos da rede espacial, este grupo espacial é não-simórfico. Na ausência de translações, os elementos deste grupo recaem nas operações de simetria de seu subgrupo isogonal C_{6v} .

O *little group* ou grupo pontual do vetor de onda $\mathbf{k}$ na rede recíproca da wurtzita é o grupo pontual C_{6v} (40). Em linhas gerais, este grupo é formado por um conjunto de seis rotações anti-horárias C_6^s em torno de um eixo paralelo a direção z dadas através dos ângulos $\phi_s = 2\pi s/6$, $s \in \{0, 1, 2, \dots, 5\}$. Na figura 2.4 ilustramos a essência da ação de cada rotação no hexágono. Em particular, a ação de um elemento de rotação C_6^s

Figura 2.4 – Rotações do grupo pontual C_{6v} em torno de um eixo paralelo a direção z .

caracterizado pelo ângulo ϕ_s pode ser representada através da matriz

$$C_6^s = \begin{bmatrix} \cos \phi_s & -\sin \phi_s \\ \sin \phi_s & \cos \phi_s \end{bmatrix}. \quad (2.21)$$

Juntas, as rotações estão divididas em quatro classes de equivalência distintas,

$$\mathcal{C}_1 = \{C_6^0\}, \quad \mathcal{C}_2 = \{C_6^3\}, \quad \mathcal{C}_3 = \{C_6^2, C_6^4\}, \quad \mathcal{C}_4 = \{C_6^1, C_6^5\}. \quad (2.22)$$

Além das simetrias de rotação, o grupo pontual C_{6v} conta ainda com seis reflexões através de espelhos paralelos a direção do eixo z que aqui designaremos por σ_s . Em geral, estes espelhos são perpendiculares ao vetor unitário $\mathbf{u}_s = (\cos \varphi_s, \sin \varphi_s, 0)$, onde $\varphi_s = \pi s/6$ e

$s \in \{0, 1, 2, \dots, 5\}$. Conforme pode ser visto na figura 2.5, os elementos $\sigma_0 = \sigma_{d1}$, $\sigma_2 = \sigma_{d2}$ e $\sigma_4 = \sigma_{d3}$ definem reflexões em torno de planos simultaneamente perpendiculares a duas arestas do hexágono. Por outro lado, $\sigma_1 = \sigma_{v1}$, $\sigma_3 = \sigma_{v2}$ e $\sigma_5 = \sigma_{v3}$ caracterizam reflexões por planos que conectam dois vértices opostos da rede hexagonal. Analogamente ao caso

Figura 2.5 – Reflexões do grupo pontual C_{6v} através de planos paralelos ao eixo z .

das simetrias de rotação, a ação dos elementos de reflexão na rede hexagonal pode ser descrita através da matriz

$$\sigma_s = \begin{bmatrix} -\cos(2\varphi_s) & -\sin(2\varphi_s) \\ -\sin(2\varphi_s) & +\cos(2\varphi_s) \end{bmatrix}. \quad (2.23)$$

As reflexões estão distribuídas em duas classes de equivalência,

$$\mathcal{C}_5 = \{\sigma_{v1}, \sigma_{v2}, \sigma_{v3}\}, \quad \mathcal{C}_6 = \{\sigma_{d1}, \sigma_{d2}, \sigma_{d3}\}. \quad (2.24)$$

Na tabela 2.2 reunimos os caracteres de cada classe de equivalência do grupo pontual C_{6v} juntamente com suas respectivas representações irredutíveis. A primeira coluna da tabela mostra os caracteres da classe $\mathcal{C}_1$ que descreve o elemento identidade das rotações para cada representação irredutível. Como é sabido, esta coluna define a dimensão destas representações. Somando os quadrados de cada um dos elementos desta coluna, é fácil perceber que o grupo tem ordem 12, ou seja, $1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 2^2 + 2^2 = 12$. Através desta tabela é possível perceber a presença de quatro representações irredutíveis unidi-

Tabela 2.2 – Caracteres das representações irredutíveis (RI) do grupo pontual C_{6v} . Enquanto as rotações estão agrupadas nas classes de equivalência C_1 , C_2 , C_3 e C_4 , as reflexões se dividem nas classes C_5 e C_6 . A terceira coluna da tabela indica a dimensão de cada representação irredutível. Através do critério de Herring (CH) (50), todas as representações irredutíveis do grupo pontual C_{6v} são reais, recebendo a classificação a .

CH	RI	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6
a	$\Gamma_1 = A_1$	1	1	1	1	1	1
a	$\Gamma_2 = A_2$	1	1	1	1	-1	-1
a	$\Gamma_3 = B_1$	1	-1	1	-1	-1	1
a	$\Gamma_4 = B_2$	1	-1	1	-1	1	-1
a	$\Gamma_5 = E_1$	2	-2	-1	1	0	0
a	$\Gamma_6 = E_2$	2	2	-1	-1	0	0

mensionais. Destas, A_1 é chamada representação fundamental ou escalar e A_2 define uma representação pseudo-escalar. Note ainda que o grupo C_{6v} dispõe de duas representações irredutíveis bidimensionais, onde E_1 é uma representação vetorial.

Agora que conhecemos um pouco das simetrias do cristal de wurtzita, vamos argumentar em favor de sua estrutura de bandas. A partir de experimentos ópticos (52) e cálculos de primeiros princípios, em particular cálculos *ab initio* (53), a estrutura de bandas mais simples em torno do ponto Γ ($k = 0$) de um material semiconductor de rede wurtzita de gap direto tem quatro bandas de energia. Sabe-se também que cada banda de energia tem propriedades de simetria bem específicas no que diz respeito às representações irredutíveis do grupo pontual C_{6v} . Para entender este fato, considere uma transição eletrônica entre dois níveis de energia distintos induzida pela interação com radiação eletromagnética. Através de técnicas experimentais como a espectroscopia Raman, sabe-se que a transição do elétron para um certo estado só é possível se o nível de energia inicial dispor das mesmas simetrias de uma representação irredutível específica do grupo pontual de simetria do cristal.

Neste sentido, na maioria das estruturas wurtzitas a banda de condução com mais baixa energia e o fundo da banda de valência estão associadas a representação irredutível escalar A_1 , também chamada fundamental ou identidade, que é unidimensional. Por outro lado, as duas superfícies de energia no topo da banda de valência se comportam de acordo com a representação irredutível vetorial bidimensional E_1 . Na figura 2.6(a) ilustramos a relação de cada nível de energia da estrutura de bandas de um cristal de wurtzita com as

representações irredutíveis A_1 e E_1 do grupo C_{6v} . Vale relembrar ao leitor que segundo o critério de Herring todas as representações irredutíveis deste grupo são reais (40). Neste

Figura 2.6 – Estrutura de bandas em torno do ponto Γ ($k = 0$) de semicondutores de gap direto cristalizados na fase wurtzita 2.6(a) e zinblende 2.6(b). A figura 2.6(a) mostra que a banda de condução (vermelho) com mais baixa energia e o fundo da banda de valência (azul) na wurtzita estão associadas a representação irredutível escalar unidimensional A_1 do grupo C_{6v} . Por outro lado, os dois níveis de energia no topo da banda de valência (verde e magenta) se transformam segundo a representação irredutível vetorial bidimensional E_1 deste grupo. Na figura 2.6(b) é possível perceber que a banda de condução (vermelho) do cristal zinblende se transforma segundo a representação identidade unidimensional Γ_1 do grupo T_d . Ademais, os níveis de energia na banda de valência (magenta, verde e azul) do cristal compartilham as simetrias da representação irredutível tridimensional Γ_4 deste mesmo grupo. Em ambas as figuras é possível ver o gap de energia E_g e o acoplamento spin-órbita Δ_{so} . Diferentemente do que acontece no caso zinblende 2.6(b), note que a presença do *split-off* do campo cristalino Δ_c quebra a degenerescência do topo da banda de valência na wurtzita 2.6(a).

ponto, é instrutivo comparar este resultado com aquele visto na estrutura de bandas de um cristal cúbico de rede zinblende. Apenas para deixar claro, um semiconductor cristalizado na fase zinblende é invariante segundo as transformações do grupo pontual de translações T_d . Este grupo possui 24 elementos de simetria (48 quando spin é incluído) e cinco representações irredutíveis classificadas como Γ_1 , Γ_2 , Γ_3 , Γ_4 e Γ_5 . Em paralelo ao que ocorre no cristal de wurtzita, através da figura 2.6(b) é possível perceber que a banda de condução do cristal zinblende se transforma segundo a representação identidade unidimensional Γ_1 do grupo T_d . Por outro lado, todas as superfícies de energia dentro da banda de valência do cristal zinblende carregam consigo as simetrias da representação irredutível tridimensional Γ_4 . O mesmo não ocorre no espectro do semiconductor de rede wurtzita, onde a presença do *split-off* do campo cristalino Δ_c quebra a degenerescência

do topo da banda de valência que se transforma de acordo com a representação bidimensional E_1 do grupo C_{6v} . Um aspecto ainda mais curioso é observado na superfície de energia do fundo da banda de valência. No semicondutor cúbico de rede zincblende este nível de energia se transforma segundo a representação tridimensional Γ_4 do grupo T_d . Contrariamente, no sistema hexagonal de rede wurtzita esta banda se comporta segundo a representação unidimensional escalar A_1 do grupo pontual C_{6v} .

Como cada nível de energia da estrutura de bandas do semicondutor de rede wurtzita está ligado às representações irredutíveis A_1 e E_1 do grupo C_{6v} , nada mais natural que comentarmos agora sobre os vetores de base relativos a estes níveis. Em resumo, escolheremos certas funções das coordenadas cartesianas como vetores de base para cada representação. Conforme discutido, o grupo espacial do sólido é formado por rotações e reflexões por vezes acopladas a vetores de translação não-primitivos. Num cristal infinito com cerca de 10^{23} átomos, é mais simples trabalhar com o grupo pontual do vetor de onda $\mathbf{k}$ no ponto Γ na zona de Brillouin. Este é o caso do grupo C_{6v} que dispõe apenas de simetrias de rotação e reflexão. Todas as operações de simetria na rede hexagonal são tomadas em relação ao eixo z . No grupo C_{6v} , por exemplo, o eixo z é invariante sob qualquer rotação C_6^s ou reflexão σ_s aplicadas a um hexágono no plano xy . Isto porque estas operações têm como referência um eixo paralelo a direção z . Este comportamento se enquadra nas características da representação irredutível escalar A_1 , que é perfeitamente simétrica. Assim, qualquer função da coordenada z é invariante à ação das operações do grupo C_{6v} . A idéia, portanto, é usar esta função como base para a representação escalar A_1 , ou seja, $\{|z_c\rangle, |z\rangle\}$, onde o índice c caracteriza a banda de condução já que, assim como a energia do fundo da banda de valência, também se transforma segundo A_1 . Por argumentos similares aos que apresentamos, a representação irredutível bidimensional E_1 tem a base formada pelos vetores $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ já que os elementos do grupo C_{6v} abrangem rotações e reflexões no plano xy . Estes resultados podem ser conferidos em tabelas comuns acerca das representações irredutíveis e seus respectivos vetores base para o grupo pontual C_{6v} (40). Se considerarmos os autoestados de spin $|\pm\rangle$ do operador σ_z , ou seja, $\sigma_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$, então a partir destes resultados truncaremos o conjunto de funções de

Bloch em (2.14) na base de oito estados que inclui spin

$$\{|z_c+\rangle, |z_c-\rangle, |x+\rangle, |x-\rangle, |y+\rangle, |y-\rangle, |z+\rangle, |z-\rangle\} . \quad (2.25)$$

Diante das simetrias de cada banda de energia do espectro da wurtzita, encontramos uma base de oito estados (incluindo spin) na qual podemos calcular a projeção do hamiltoniano de Kane dado em (2.8). Uma pergunta muito pertinente se refere aos demais níveis de energia da estrutura de bandas. Por exemplo, logo acima da banda de condução mostrada na figura 2.6(a) aparece outro nível de energia que não estamos levando em conta. Bem, é aí que entra o *modelo de Kane* (31,47): a inclusão das bandas remotas às bandas de condução e valência é feita de forma perturbativa (32–34). Visando uma simplicidade ainda maior, aqui simplesmente ignoraremos os efeitos de todas as bandas remotas àquelas já tratadas.

Conforme mostrado na equação (2.8), o hamiltoniano de Kane vindo da projeção da equação de Pauli na base de autoestados de Bloch tem a forma

$$H = H_0 + H_{so} + H_{kp}, \quad (2.26)$$

onde H_0 pode ser interpretado como o hamiltoniano que descreve um elétron com momentum linear $\mathbf{p}$ sujeito ao potencial de interação $V(\mathbf{r})$ da rede,

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) . \quad (2.27)$$

O termo H_{so} representa a interação spin-órbita usual através do operador momentum angular de spin,

$$H_{so} = \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\sigma} , \quad \mathbf{S} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p} , \quad (2.28)$$

e H_{kp} claramente descreve a interação que atribui o nome ao método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$,

$$H_{kp} = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \left\{ \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r}) \right\} , \quad (2.29)$$

onde $\mathbf{k}$ é o vetor de onda. Cada termo do hamiltoniano de Kane também se transforma de maneira distinta frente a ação das operações de simetria do grupo pontual C_{6v} (46,

47). A componente z de um pseudo-vetor* como o operador momentum angular de spin $\mathbf{S}$, se transforma segundo as bases da representação pseudo-escalar A_2 . Por outro lado, a componente z do operador momentum linear $\mathbf{p}$ se transforma segundo as funções associadas a representação escalar A_1 . As componentes p_x , p_y , S_x e S_y dos operadores momentum linear e angular no plano, respectivamente, possuem as mesmas simetrias das funções associadas a representação irredutível vetorial E_1 . O leitor pode conferir maiores detalhes desta argumentação no apêndice A.

Para encerrar esta seção, é importante deixar clara a receita que nos levará à matriz de Kane 8×8 a partir da equação (2.14) e das funções de Bloch escolhidas como sendo os autoestados que compõem a base dada em (2.25). Em primeiro lugar, vamos projetar o hamiltoniano H_0 na base de estados degenerada por spin e diagonalizar a matriz resultante deste processo. O conjunto de autovetores que virá da solução deste problema de autovalor representará a nova base de autoestados que utilizaremos para calcular os elementos de matriz de H_{so} . Em seguida, diagonalizaremos exatamente esta representação matricial de H_{so} . O conjunto de autovetores desta matriz formará a base de 8 estados definitiva do problema. E como calcular os elementos de matriz de H_0 , H_{so} e H_{kp} na base (2.25)? Em suma, usaremos os resultados do teorema enunciado no apêndice A, o qual se baseia na decomposição do produto direto entre as representações irredutíveis relativas aos estados e o operador envolvidos no cálculo do elemento de matriz. Segundo o teorema, os elementos de matriz dos operadores que formam o hamiltoniano de Kane H se anulam por razões de simetria sempre que o produto direto das representações irredutíveis envolvidas não contém a representação identidade A_1 do grupo pontual C_{6v} . Além disto, o número de elementos de matriz não-nulos independentes é igual a multiplicidade da representação fundamental A_1 em cada decomposição dos produtos diretos.

*Um pseudo-vetor representa uma quantidade que se transforma como um vetor mas muda de sinal devido a rotações impróprias. Este elemento de simetria, por sua vez, se caracteriza por uma rotação de $2\pi/n$ seguida de uma reflexão em relação a um plano perpendicular ao eixo de rotação.

2.3 Elementos de matriz da interação cinética

Nesta seção mostraremos como calcular a projeção do hamiltoniano H_0 na base de estados formada pelas funções de Bloch $|u_{s,0}\rangle$ degeneradas pelos estados de spin do operador σ_z dados por $|\pm\rangle$, ou seja, $\{|u_{s,0}, n\rangle\}$, onde $n = \pm$. Como já comentado, o hamiltoniano H_0 dado em (2.27) descreve um elétron de massa m_0 sob ação do potencial periódico $V(\mathbf{r})$ da rede cristalina. Entretanto, uma vez que H_0 não depende em spin,

$$\langle u_{l,0}, m | H_0 | u_{s,0}, n \rangle = \langle u_{l,0} | H_0 | u_{s,0} \rangle \langle m | n \rangle = \langle u_{l,0} | H_0 | u_{s,0} \rangle \delta_{m,n} . \quad (2.30)$$

Assim, é suficiente utilizar a base $\{|z_c\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$ para calcular cada elemento de matriz vindo da projeção. Em termos de simetrias, o hamiltoniano H_0 se comporta como um escalar uma vez que o potencial $V(\mathbf{r})$ é invariante sob a ação de qualquer elemento do grupo pontual que descreve a rede wurtzita. Em outras palavras, H_0 se transforma segundo a representação irreduzível fundamental A_1 do grupo C_{6v} . Apenas para relembrar, os estados $\{|z_c\rangle, |z\rangle\}$ também se transformam segundo esta representação irreduzível. Por outro lado, $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ compartilham das mesmas simetrias que a representação irreduzível vetorial E_1 deste mesmo grupo pontual.

Mas como calcular todos os elementos de matriz da projeção de H_0 na base de estados $\{|z_c\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$? Como já discutimos na seção anterior e demonstramos no apêndice A, partiremos de um importante resultado da teoria dos grupos no qual cada elemento de matriz é analisado via o produto direto das representações irreduzíveis segundo as quais tanto o operador quanto os estados envolvidos se transformam. Na tabela 2.3 reunimos os principais resultados da projeção e suas respectivas análises em termos do produto direto das representações irreduzíveis associadas aos estados da base e ao operador H_0 . No intuito de reduzir o número de elementos de matriz calculados e tendo em vista que os estados $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ possuem as mesmas simetrias, adotamos $i \in \{1, 2\}$, com $x_1 = x$ e $x_2 = y$. O elemento de matriz $\langle z_c | H_0 | x_i \rangle$ representa o acoplamento entre os estados da banda de condução e topo da banda de valência. Por outro lado, o elemento $\langle x_i | H_0 | x_j \rangle$ representa

Tabela 2.3 – Elementos de matriz de H_0 na base $\{|z_c\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$, onde $|z_c\rangle$ representa a banda de condução, $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ indicam o topo da banda de valência e $|z\rangle$ descreve a banda de *split-off* do campo cristalino. Aqui $i \in \{1, 2\}$, com $x_1 = x$ e $x_2 = y$.

Elementos de matriz	Produtos diretos
$\langle z_c H_0 z_c \rangle = \epsilon_1$	$A_1 \otimes A_1 \otimes A_1 = A_1$
$\langle z_c H_0 x_i \rangle = 0$	$A_1 \otimes A_1 \otimes E_1 = E_1$
$\langle z_c H_0 z \rangle = \epsilon_3$	$A_1 \otimes A_1 \otimes A_1 = A_1$
$\langle x_i H_0 x_i \rangle = E_v$	$E_1 \otimes A_1 \otimes E_1 = A_1 \oplus A_2 \oplus E_1$
$\langle x_i H_0 x_j \rangle = 0$	$E_1 \otimes A_1 \otimes E_1 = A_1 \oplus A_2 \oplus E_1$
$\langle x_i H_0 z \rangle = 0$	$E_1 \otimes A_1 \otimes A_1 = E_1$
$\langle z H_0 z \rangle = \epsilon_2$	$A_1 \otimes A_1 \otimes A_1 = A_1$

o acoplamento entre estados relativos ao topo da banda de valência, descrevendo um acoplamento intrabanda. O elemento de matriz $\langle x_i | H_0 | z \rangle$ se refere ao acoplamento entre os estados do topo da banda de valência e a banda de *split-off* do campo cristalino. Segundo o teorema no apêndice A, todos estes elementos de matriz de H_0 se anulam por razões de simetria uma vez que o produto direto das representações irredutíveis envolvidas não contém a representação identidade A_1 do grupo pontual C_{6v} . Assim, nos demais termos, o número de elementos de matriz não-nulos independentes é igual a multiplicidade da representação fundamental A_1 em cada decomposição dos produtos diretos. É o que acontece com as energias ϵ_1 , ϵ_2 , ϵ_3 e E_v .

A energia ϵ_1 define o acoplamento entre estados da própria banda de condução, o que também caracteriza um elemento de matriz intrabanda. O mesmo acontece com as energias E_v e ϵ_2 que representam, respectivamente, acoplamentos entre os estados da própria banda de *split-off* do campo cristalino e entre os estados do topo da banda de valência. O termo ϵ_3 indica o acoplamento entre as bandas de condução e *split-off* do campo cristalino e não está presente no caso zincblende (34). Muito embora seja uma característica exclusiva da simetria de sistemas hexagonais, é frequentemente ignorado na maior parte dos trabalhos acerca de semicondutores cristalizados na fase wurtzita (38, 54). Curiosamente, muito embora o produto tensorial das representações irredutíveis no elemento de matriz $\langle x_i | H_0 | x_j \rangle$ que acopla bandas de valência distintas apresente a representação escalar A_1 , este termo é identicamente nulo. Para verificar como isto acontece, devemos recorrer a ação dos elementos de simetria do grupo pontual C_{6v} . Existe um

elemento de simetria, particularmente a reflexão dada por σ_{d1} , que pode facilitar o cálculo, a saber,

$$\langle x|H_0|y\rangle = \langle x|\sigma_{d1}^{-1}(\sigma_{d1}H_0\sigma_{d1}^{-1})\sigma_{d1}|y\rangle = -\langle x|H_0|y\rangle . \quad (2.31)$$

O leitor pode consultar a ação do operador σ_{d1} nos estados $|x\rangle$ e $|y\rangle$ no apêndice A. Em outras palavras, dado que a transformação de simetria é caracterizada pela ação de uma matriz unitária no hamiltoniano H_0 que se comporta como a identidade A_1 do grupo, segue então que o elemento de matriz é identicamente nulo e demonstramos o resultado indicado na quinta linha da tabela apresentada anteriormente, ou seja, dados $i, j \in \{1, 2\}$ e $i \neq j$, com $x_1 = x$ e $x_2 = y$, temos

$$\langle x_i|H_0|x_j\rangle = 0 . \quad (2.32)$$

Agora que conhecemos todos os elementos de matriz de H_0 , estamos prontos para escrever sua representação matricial na base $\{|z_c\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$. A idéia consiste em diagonalizar esta matriz calculando os autovalores e autovetores de H_0 . Antes, porém, se escolhermos o particular ordenamento da base $\{|x\rangle, |y\rangle, |z_c\rangle, |z\rangle\}$ a representação de H_0 será bem mais simples em virtude da presença de apenas dois blocos de matriz facilmente diagonalizáveis. Procedendo neste sentido,

$$H_0 = \begin{bmatrix} H_0^d & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} \\ 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & H_0^{nd} \end{bmatrix}, \quad H_0^d = E_v \mathbf{1}_{2 \times 2}, \quad H_0^{nd} = \epsilon_+ \mathbf{1}_{2 \times 2} + \epsilon_- \sigma_z + \epsilon_3 \sigma_x, \quad (2.33)$$

onde as energias $\epsilon_{\pm}$ são dadas através da relação

$$\epsilon_{\pm} = \frac{1}{2}(\epsilon_1 \pm \epsilon_2) . \quad (2.34)$$

O bloco H_0^d é diagonal uma vez que o produto direto das representações irredutíveis associadas aos estados envolvidos em cada elemento de matriz de H_0 exclui a possibilidade de acoplamento entre bandas de valência distintas. Naturalmente, os autovetores desta matriz são os estados relativos ao topo da banda de valência, $\{|x\rangle, |y\rangle\}$. O bloco H_0^{nd} é não-diagonal e representa os acoplamentos entre as bandas de condução e *split-off* do campo cristalino na figura dos estados $\{|z_c\rangle, |z\rangle\}$. Em particular, esta matriz satisfaz a

equação de autovalor

$$H_0^{nd}|u_{\pm}\rangle = E_{\pm}|u_{\pm}\rangle , \quad (2.35)$$

onde as energias $E_{\pm}$ representam a banda de condução e o fundo da banda de valência no espectro da wurtzita e são definidas por

$$E_{\pm} = \epsilon_+ \pm \epsilon_- \sqrt{1 + \chi^2} , \quad \chi = \frac{\epsilon_3}{\epsilon_-} . \quad (2.36)$$

Note que χ representa um parâmetro puramente adimensional nas energias $E_{\pm}$ do bloco H_0^{nd} . Os autovetores $|u_{\pm}\rangle$ desta matriz já devidamente normalizados são escritos na forma

$$|u_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} (|z_c\rangle + \alpha|z\rangle) , \quad |u_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} (|z\rangle - \alpha|z_c\rangle) , \quad (2.37)$$

onde α é função do parâmetro adimensional χ , ou seja, $\alpha = \alpha(\chi)$, e é dado através da equação

$$\alpha = \frac{\chi}{1 + \sqrt{1 + \chi^2}} . \quad (2.38)$$

Note que se $\epsilon_3 = 0$, então $\alpha = 0$ já que $\chi = 0$. Neste caso limite, $|u_+\rangle = |z_c\rangle$ e $|u_-\rangle = |z\rangle$. Observe ainda que os autoestados $|u_{\pm}\rangle$ herdam as simetrias dos vetores $\{|z_c\rangle, |z\rangle\}$, ou seja, também se transformam segundo a representação irredutível escalar A_1 do grupo pontual C_{6v} . Se ϵ_- e o gap de energia E_g têm a mesma ordem de grandeza, então é possível que em alguns materiais a condição $\chi \ll 1$ se aplique. Assim, expandindo as energias $E_{\pm}$ em primeira ordem no parâmetro adimensional χ , o autovalor $E_+ \approx \epsilon_1$ representa a energia do fundo da banda de condução e $E_- \approx \epsilon_2$ define a energia do fundo da banda de valência.

Concluída a diagonalização do bloco H_0^{nd} , temos em mãos a base de estados na qual o hamiltoniano H_0 é diagonal. Em particular, seguindo o ordenamento dos vetores $\{|u_+\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |u_-\rangle\}$, então a representação matricial de H_0 é diagonal, ou seja, $H_0 = \text{diag}(E_+, E_v, E_v, E_-)$. Na seção 2.4 vamos discutir como calcular a projeção do hamiltoniano H_{so} que descreve a interação spin-órbita nesta nova base. Já que H_{so} depende em spin, o número de elementos desta base será duplicado tendo em vista a multiplicidade dos estados $|\pm\rangle$ do operador σ_z .

2.4 Elementos de matriz da interação spin-órbita

Uma vez que o hamiltoniano H_{so} descrevendo a interação spin-órbita dado na equação (2.28) é dependente em spin, a base de estados utilizada na seção anterior deve ser modificada para incluir os autoestados $|\pm\rangle$ do operador σ_z , ou seja,

$$\{|u_++\rangle, |u_+-\rangle, |x+\rangle, |x-\rangle, |y+\rangle, |y-\rangle, |u_-+\rangle, |u_- -\rangle\}, \quad (2.39)$$

onde $|x\pm\rangle = |x\rangle \otimes |\pm\rangle$ e $|u_\pm\rangle$ é dado na equação (2.37). Se queremos determinar a projeção do operador H_{so} nos elementos da base em (2.39) devemos portanto saber calcular os elementos de matriz

$$\langle u_{l,0}, m | H_{so} | u_{s,0}, n \rangle = (\langle u_{l,0} | S_x | u_{s,0} \rangle + in \langle u_{l,0} | S_y | u_{s,0} \rangle) (1 - \delta_{m,n}) + n \langle u_{l,0} | S_z | u_{s,0} \rangle \delta_{m,n}, \quad (2.40)$$

onde $|u_{s,0}\rangle \in \{|u_+\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |u_-\rangle\}$ são as funções periódicas de Bloch e $|n\rangle \in \{|+\rangle, |-\rangle\}$ os autoestados do operador σ_z . Observe que para o caso $n = m$ a projeção da interação spin-órbita depende da componente S_z , ao passo que se $n \neq m$ a projeção de H_{so} é função dos elementos de matriz dos operadores S_x e S_y . Assim como fizemos na seção 2.3, analisaremos as decomposições dos produtos diretos entre as representações irredutíveis associadas aos estados da base e ao operador $\mathbf{S}$. Conforme já mencionamos, as componentes S_x e S_y se transformam segundo a representação vetorial E_1 , enquanto S_z se comporta de acordo com a representação pseudo-escalar A_2 do grupo pontual C_{6v} (40). Na tabela 2.4 reunimos os principais resultados envolvendo os elementos de matriz de $\mathbf{S}$ seguindo a prescrição das simetrias envolvidas. Segundo o teorema do apêndice A, se o produto direto das representações irredutíveis associadas aos estados da base e ao operador $\mathbf{S}$ não apresenta a representação identidade A_1 do grupo pontual C_{6v} , então todos os elementos de matriz de $\mathbf{S}$ se anulam por razões de simetria. Mas e quanto aos termos não-nulos? E mais, como surge o termo imaginário em cada um deles? Para entender como os elementos de matriz não-nulos na tabela 2.4 são calculados, devemos recorrer ao uso da simetria de reversão temporal (SRT) (50), particularmente na figura do operador $K = C\sigma_y$, onde

Tabela 2.4 – Elementos de matriz de H_{so} na base $\{|z_c\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$, onde $|z_c\rangle$ representa a banda de condução, $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ indicam o topo da banda de valência e $|z\rangle$ descreve a banda de *split-off* do campo cristalino. Aqui $\{i, j, k\} \in \{1, 2\}$, com $x_1 = x$, $x_2 = y$, $S_1 = S_x$, $S_2 = S_y$ e $S_3 = S_z$. Note ainda que o operador $\mathbf{S}$ se transforma segundo a representação $A_2 \oplus E_1$.

Elementos de matriz	Produtos diretos
$\langle z_c \mathbf{S} z_c \rangle = 0$	$A_1 \otimes (A_2 \oplus E_1) \otimes A_1 = A_2 \oplus E_1$
$\langle z_c S_x y \rangle = -\langle z_c S_y x \rangle = i\Delta_4$	$A_1 \otimes E_1 \otimes E_1 = A_1 \oplus A_2 \oplus E_2$
$\langle z_c S_z x_i \rangle = 0$	$A_1 \otimes A_2 \otimes E_1 = E_1$
$\langle z_c \mathbf{S} z \rangle = 0$	$A_1 \otimes (A_2 \oplus E_1) \otimes A_1 = A_2 \oplus E_1$
$\langle x_i S_j x_k \rangle = 0$	$E_1 \otimes E_1 \otimes E_1 = B_1 \oplus B_2 \oplus 3E_1$
$\langle y S_z x \rangle = -\langle x S_z y \rangle = i\Delta_2$	$E_1 \otimes A_2 \otimes E_1 = A_1 \oplus A_2 \oplus E_2$
$\langle x S_y z \rangle = -\langle y S_x z \rangle = i\Delta_3$	$E_1 \otimes E_1 \otimes A_2 = A_1 \oplus A_2 \oplus E_2$
$\langle x_i S_z z \rangle = 0$	$E_1 \otimes A_2 \otimes A_1 = E_1$
$\langle z S_z z \rangle = 0$	$A_1 \otimes A_2 \otimes A_1 = A_2$

C define o conjugado complexo. É importante destacar que esta forma do operador de reversão temporal é conveniente quando lidamos com operadores ou funções definidas no espaço de spins. Se, porventura, não trabalharmos neste contexto, então o operador K é dado apenas em termos do conjugado complexo C , isto é, $K = C$. Sob ação do operador K , o momentum linear $\mathbf{p}$ muda de sinal, $K\mathbf{p}K^{-1} = -\mathbf{p}$. Naturalmente, já que o operador $\mathbf{S}$ depende do momentum linear, ele também carrega esta simetria, $K\mathbf{S}K^{-1} = -\mathbf{S}$. Feitos os devidos adendos, vamos tomar o elemento de matriz $\langle z_c | S_x | y \rangle$ para exemplificar o uso da reversão temporal no seu cálculo,

$$\langle z_c | S_x | y \rangle = (K\langle y |) (KS_x^\dagger K^{-1}) (K|z_c\rangle) . \quad (2.41)$$

Sabemos que os estados $\{|z_c\rangle, |z\rangle\}$ se transformam segundo a representação escalar A_1 , que naturalmente é real. Mais que isso, segundo o *critério de Herring* (15, 30, 50) todas as representações irredutíveis do grupo pontual C_{6v} são reais e, portanto, invariantes sob ação do operador reversão temporal $K = C$, ou seja, $C|y\rangle = |y\rangle$ e $C|x\rangle = |x\rangle$. Assim, dado que S_x é um operador hermiteano e $KS_xK^{-1} = -S_x$, então

$$\langle z_c | S_x | y \rangle = -\langle y | S_x | z_c \rangle = -\langle z_c | S_x | y \rangle^* . \quad (2.42)$$

Através desta equação concluímos que o elemento de matriz $\langle z_c | S_x | y \rangle$ é um número puramente imaginário. Uma vez que este termo representa o acoplamento entre as bandas de

condução e o topo da banda de valência, se definirmos $|\langle z_c | S_x | y \rangle| = \Delta_4$ é perfeitamente lícito escrever

$$\langle z_c | S_x | y \rangle = i |\langle z_c | S_x | y \rangle| = i \Delta_4 . \quad (2.43)$$

O mesmo raciocínio se aplica aos demais elementos de matriz não-nulos indicados na tabela 2.4. Já que falamos de Δ_4 , é interessante ressaltar que este é o único acoplamento permitido entre as bandas de condução e valência. Ademais, este termo é ignorado na maior parte das referências que tratam de semicondutores de rede wurtzita (25, 30, 38).

Esclarecidos todos os pontos a respeito do uso das simetrias, para calcular a representação matricial da interação spin-órbita na base de estados 2.39 devemos então substituir os resultados da tabela 2.4 na equação (2.40) e calcular todos os elementos de matriz. Assim, temos

$$H_{so} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -\Lambda_1 & 0 & i\Lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda_1 & 0 & i\Lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \Lambda_1 & 0 & 0 & -i\Delta_2 & 0 & 0 & \Lambda_2 \\ -\Lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & i\Delta_2 & -\Lambda_2 & 0 \\ 0 & -i\Lambda_1 & i\Delta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\Lambda_2 \\ -i\Lambda_1 & 0 & 0 & -i\Delta_2 & 0 & 0 & -i\Lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Lambda_2 & 0 & i\Lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda_2 & 0 & i\Lambda_2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} , \quad (2.44)$$

onde Λ_1 e Λ_2 são dados pelas equações

$$\Lambda_1 = \frac{\alpha \Delta_3 + \Delta_4}{\sqrt{1 + \alpha^2}} , \quad \Lambda_2 = \frac{\Delta_3 - \alpha \Delta_4}{\sqrt{1 + \alpha^2}} . \quad (2.45)$$

O leitor pode consultar as equações (2.36) e (2.38) para ver que a escolha da energia $\epsilon_3 = 0$ leva à identidade $\alpha = 0$. Se, além disso, tomarmos o acoplamento $\Delta_4 = 0$, então $\Lambda_1 = 0$ e $\Lambda_2 = \Delta_3$. Em virtude destas escolhas, apenas os elementos do bloco 6×6 no hamiltoniano H_{so} em (2.44) seriam diferentes de zero.

Agora que conhecemos a representação matricial da interação spin-órbita, devemos naturalmente determinar seus autovalores e autovetores. Aliás, o conjunto de autovetores

do operador H_{so} formará a base de estados segundo a qual construiremos a matriz de Kane 8×8 . Deixando mais claro, truncaremos o conjunto de funções $\langle \mathbf{r} | u_{l,0} \rangle = u_{l,0}(\mathbf{r})$ segundo o qual a equação (2.14) foi obtida em termos dos oito autoestados da matriz dada em (2.44). As energias $\varepsilon_{l,0}$ que aparecem em (2.14) serão então dadas pela soma dos autovalores de H_{so} com aqueles vindos da projeção de $H_0 = \text{diag}(E_+, E_v, E_v, E_-)$ na base da interação spin-órbita.

A representação matricial do hamiltoniano spin-órbita em (2.44) possui um conjunto de quatro autovalores duplamente degenerados. Destes, os dois primeiros são $\lambda_1 = 0$ e $\lambda_2 = \Delta_2$. Os outros dois autovalores são

$$\lambda_{\pm} = \pm \frac{\Delta_2}{2} (\beta \mp 1) , \quad (2.46)$$

onde β define um parâmetro adimensional dado por

$$\beta = \sqrt{1 + 8 \left(\frac{\Lambda_1^2 + \Lambda_2^2}{\Delta_2^2} \right)} , \quad \Lambda_1^2 + \Lambda_2^2 = \Delta_3^2 + \Delta_4^2 . \quad (2.47)$$

Vale ressaltar que esta diagonalização é exata, livre de qualquer tipo de aproximação. Um aspecto interessante acerca deste resultado está na quebra de parte das degenerescências do espectro de H_{so} introduzida pelo acoplamento $\Delta_4 \neq 0$. Para verificar isso, observe que se tomarmos $\Delta_4 = 0$ e $\Delta_3 = \Delta_2$, então $\beta = 3$ e os autovalores do hamiltoniano spin-órbita se reduzem a $\lambda_1 = 0$ e $\lambda_- = -2\Delta_2$, ambos duplamente degenerados, e $\lambda_+ = \Delta_2$, quadruplamente degenerado. Este é o resultado observado para os autovalores de H_{so} em sistemas cúbicos, particularmente semicondutores de rede zincblende (21, 32, 43). Em face da degenerescência dos autovalores de H_{so} , é necessário recorrer ao método de ortonormalização de *Gram-Schmidt* (55) para calcular seus respectivos autovetores. Na tabela 2.5 apresentamos o conjunto dos autoestados do hamiltoniano spin-órbita dado em (2.44).

Os estados $|z_{\pm}\rangle$ são dados através das equações

$$|z_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta_3^2 + \Delta_4^2}} (\Lambda_2 |u_{+}\rangle - \Lambda_1 |u_{-}\rangle) = \frac{1}{\sqrt{\Delta_3^2 + \Delta_4^2}} (\Delta_3 |z_c\rangle - \Delta_4 |z\rangle) , \quad (2.48)$$

$$|z_{+}\rangle = \frac{1}{\Delta_2} (\Lambda_1 |u_{+}\rangle + \Lambda_2 |u_{-}\rangle) = \frac{1}{\Delta_2} (\Delta_4 |z_c\rangle + \Delta_3 |z\rangle) . \quad (2.49)$$

Tabela 2.5 – Base de autoestados e autovalores do operador spin-órbita H_{so} . O leitor pode perceber também os elementos de matriz vindos da projeção de H_0 nos estados desta base. Note que os estados $|z_{\pm}\rangle$ dados em (2.48) e (2.49) compartilham a mesma simetria escalar que os estados $|z_c\rangle$ e $|z\rangle$. O parâmetro adimensional β é apresentado em (2.47) e os autovalores $\lambda_{\pm}$ estão em (2.46). As energias E_0 e E_c são dadas na equação (2.50).

l	$ v_l\rangle$	$\langle v_l H_{so} v_l\rangle$	$\langle v_l H_0 v_l\rangle$
1	$i z_{-}\rangle \otimes +\rangle$	0	E_c
2	$i z_{-}\rangle \otimes -\rangle$	0	E_c
3	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(x\rangle + i y\rangle) \otimes +\rangle$	Δ_2	E_v
4	$-\frac{1}{\sqrt{\beta(\beta-1)}} \left\{ \frac{(\beta-1)}{2} (x\rangle + i y\rangle) \otimes -\rangle - 2 z_{+}\rangle \otimes +\rangle \right\}$	λ_{+}	$\frac{(\beta-1)}{2\beta} E_v + \frac{4}{\beta(\beta-1)} E_0$
5	$+\frac{1}{\sqrt{\beta(\beta-1)}} \left\{ \frac{(\beta-1)}{2} (x\rangle - i y\rangle) \otimes +\rangle + 2 z_{+}\rangle \otimes -\rangle \right\}$	λ_{+}	$\frac{(\beta-1)}{2\beta} E_v + \frac{4}{\beta(\beta-1)} E_0$
6	$+\frac{1}{\sqrt{2}}(x\rangle - i y\rangle) \otimes -\rangle$	Δ_2	E_v
7	$-\frac{2}{\sqrt{\beta(\beta+1)}} \left\{ \frac{(\beta+1)}{4} (x\rangle + i y\rangle) \otimes -\rangle + z_{+}\rangle \otimes +\rangle \right\}$	λ_{-}	$\frac{(\beta+1)}{2\beta} E_v + \frac{4}{\beta(\beta+1)} E_0$
8	$-\frac{2}{\sqrt{\beta(\beta+1)}} \left\{ \frac{(\beta+1)}{4} (x\rangle - i y\rangle) \otimes +\rangle - z_{+}\rangle \otimes -\rangle \right\}$	λ_{-}	$\frac{(\beta+1)}{2\beta} E_v + \frac{4}{\beta(\beta+1)} E_0$

Tanto $|z_{+}\rangle$ quanto $|z_{-}\rangle$ herdam as simetrias dos estados $|z_c\rangle$ e $|z\rangle$, ou seja, se transformam segundo a representação irredutível fundamental A_1 do grupo pontual C_{6v} . Note a presença do parâmetro β nos estados classificados pelos índices $l = 4, 5, 7, 8$. Muito embora os estados com $l = 1, 2$ não dependam de β , ainda são funções do parâmetro α definido em (2.38). Por outro lado, os estados rotulados pelos índices $l = 3, 6$ têm um caráter extremamente robusto uma vez que são totalmente insensíveis à presença de qualquer parâmetro, em particular ao acoplamento Δ_4 e a energia ϵ_3 ou ainda a escolhas para Δ_2 e Δ_3 . Observe que se $\Delta_3^2 + \Delta_4^2 = \Delta_2^2$, ou seja, $\beta = 3$ através da equação (2.47), os autovetores de H_{so} se tornam iguais aqueles obtidos a partir da interação spin-órbita em sistemas cúbicos (32, 43). Na tabela 2.5 mostramos ainda os elementos de matriz vindos da projeção do hamiltoniano cinético H_0 nos autoestados da interação spin-órbita. As energias E_c e E_0 são dadas pelas relações

$$E_c = \frac{1}{\Delta_3^2 + \Delta_4^2} (\epsilon_1 \Delta_3^2 + \epsilon_2 \Delta_4^2 - 2\epsilon_3 \Delta_3 \Delta_4) , \quad E_0 = \frac{1}{\Delta_2^2} (\epsilon_2 \Delta_3^2 + \epsilon_1 \Delta_4^2 + 2\epsilon_3 \Delta_3 \Delta_4) . \quad (2.50)$$

Estas energias guardam consigo todas as informações do acoplamento entre $|z\rangle$ e $|z_c\rangle$ dado pelos estados $|u_{\pm}\rangle$ definidos na equação (2.37). A assinatura deste acoplamento é dada através da dependência dos estados $|u_{\pm}\rangle$ com o coeficiente α que é função das energias ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 .

Agora que temos a base na qual a matriz de Kane 8×8 será construída, o próximo passo consiste em calcular a projeção do operador H_{kp} nos seus respectivos estados. Estamos caminhando para uma formulação extremamente geral do modelo de Kane uma vez que não desprezamos nenhum dos acoplamentos Δ_l ou energias ϵ_l . Desta forma, calcular os elementos de matriz do hamiltoniano H_{kp} nos estados indicados na tabela 2.5 pode não ser uma tarefa das mais fáceis dada a dependência no parâmetro β . Existe uma forma de eliminar a dependência dos autovetores da interação spin-órbita no parâmetro β sem perder a generalidade dos resultados que obtivemos até agora. No fundo, a idéia consiste em traçar um paralelo entre este resultado e aquele observado no modelo de Kane em sistemas cúbicos mantendo todos os acoplamentos Δ_2 , Δ_3 e Δ_4 ainda em jogo. Isto pode ser naturalmente feito se escrevermos alguns destes parâmetros em função de outros. Dedicaremos a seção 2.4.1 para explicar a essência desta idéia que chamamos parametrização quase-cúbica.

2.4.1 A parametrização quase-cúbica

Em geral, no modelo de Kane em sistemas cúbicos o acoplamento induzido pela interação spin-órbita entre as bandas de condução e valência é nulo via argumentos de simetria de reversão temporal (21) ou considerado desprezível tendo como base a primeira hipótese de Kane (46). Em sistemas hexagonais como é o caso da wurtzita, o parâmetro Δ_4 é o único responsável pela interação entre as bandas de condução e valência. Isto pode ser facilmente notado analisando a tabela 2.5. Assim, poderíamos escolher $\Delta_4 = 0$ numa tentativa de reproduzir o modelo de Kane em sistemas cúbicos o que, na prática, representaria uma total perda da generalidade dos resultados encontrados até o momento. Entretanto, existe uma forma bem simples de escrever Δ_3 e Δ_4 tal que parte desta generalidade ainda seja preservada. Partindo da equação (2.47), note que se $\Delta_3^2 + \Delta_4^2 = \Delta_2^2$ então $\beta = 3$ e os autoestados de H_{so} se tornam iguais aqueles da interação spin-órbita

em sistemas cúbicos (32, 43). Então podemos propor uma maneira geral de escrever os acoplamentos Δ_3 e Δ_4 em termos de Δ_2 ,

$$\Delta_2 = \Delta, \quad \Delta_3 = \Delta \cos \vartheta, \quad \Delta_4 = \Delta \sin \vartheta. \quad (2.51)$$

Nesta parametrização $\beta = 3$, tal que os autovalores de H_{so} dados em (2.46) tornam-se $\lambda_+ = \Delta$ e $\lambda_- = -2\Delta$, ou seja, o hamiltoniano H_{so} do sistema hexagonal de rede wurtzita tem o mesmo espectro que o observado em sistemas cúbicos (42, 44). Note que muito embora os espectros sejam iguais em ambos os casos, no sistema hexagonal os estados de simetria escalar $|z_c\rangle$ e $|z\rangle$ são reescritos em termos da combinação linear

$$|z_-\rangle = \cos \vartheta |z_c\rangle - \sin \vartheta |z\rangle, \quad |z_+\rangle = \sin \vartheta |z_c\rangle + \cos \vartheta |z\rangle. \quad (2.52)$$

Esta parametrização, a qual será usada em todo este trabalho, chamamos *parametrização quase-cúbica* (PqC). Na tabela 2.6, apresentamos as principais consequências desta parametrização em relação aos autoestados da interação spin-órbita e a soma entre os elementos de matriz de H_0 e H_{so} nesta base. As energias E_c e E_0 na parametrização quase-cúbica são dadas pelas novas relações

$$E_c = \epsilon_1 \cos^2 \vartheta + \epsilon_2 \sin^2 \vartheta - \epsilon_3 \sin(2\vartheta), \quad E_0 = \epsilon_2 \cos^2 \vartheta + \epsilon_1 \sin^2 \vartheta + \epsilon_3 \sin(2\vartheta). \quad (2.53)$$

Tabela 2.6 – Base de autoestados da interação spin-órbita do sistema hexagonal de rede wurtzita e soma dos autovalores de H_{so} e H_0 na parametrização quase-cúbica (PqC) (2.51) onde $\beta = 3$. Os novos estados $|z_{\pm}\rangle$ dados em (2.52) compartilham a mesma simetria escalar que os estados $|z_c\rangle$ e $|z\rangle$. As energias E_0 e E_c são apresentadas na equação (2.53).

l	$ v_l\rangle$	$\langle v_l H_0 + H_{so} v_l \rangle$
1	$i z_-\rangle \otimes +\rangle$	E_c
2	$i z_-\rangle \otimes -\rangle$	E_c
3	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(x\rangle + i y\rangle) \otimes +\rangle$	$E_v + \Delta$
4	$-\frac{1}{\sqrt{6}}\{(x\rangle + i y\rangle) \otimes -\rangle - 2 z_+\rangle \otimes +\rangle\}$	$\frac{1}{3}(E_v + 2E_0) + \Delta$
5	$+\frac{1}{\sqrt{6}}\{(x\rangle - i y\rangle) \otimes +\rangle + 2 z_+\rangle \otimes -\rangle\}$	$\frac{1}{3}(E_v + 2E_0) + \Delta$
6	$+\frac{1}{\sqrt{2}}(x\rangle - i y\rangle) \otimes -\rangle$	$E_v + \Delta$
7	$-\frac{1}{\sqrt{3}}\{(x\rangle + i y\rangle) \otimes -\rangle + z_+\rangle \otimes +\rangle\}$	$\frac{1}{3}(2E_v + E_0) - 2\Delta$
8	$-\frac{1}{\sqrt{3}}\{(x\rangle - i y\rangle) \otimes +\rangle - z_+\rangle \otimes -\rangle\}$	$\frac{1}{3}(2E_v + E_0) - 2\Delta$

Agora que encontramos uma forma particularmente simples de escrever a base adap-

tada à simetria do hamiltoniano $H_0 + H_{so}$ que descreve um elétron sob influência da interação spin-órbita, o próximo passo consiste em calcular a projeção de H_{kp} dado em (2.29) nos estados da tabela 2.6. Este resultado, enfim, fornecerá a matriz de Kane 8×8 para uma monoestrutura semicondutora de rede wurtzita. Naturalmente, os elementos diagonais $\varepsilon_{l,0}$ dados em (2.14) desta matriz serão funções dos elementos na terceira coluna da tabela 2.6. Sendo mais claro, o resultado dependerá das energias E_c , E_0 , E_v e do acoplamento Δ os quais, até o momento, não temos nenhuma informação experimental. Mas então como podemos representar estas energias tendo em vista o respaldo experimental? A idéia será escrevê-las em termos dos parâmetros $(E_g, \Delta_c, \Delta_{so})$ da própria estrutura de bandas da wurtzita. Estes gaps são medidos e seus valores estão reportados em algumas referências (52,53). Na prática, estes gaps são determinados tomando a diferença entre níveis de energia consecutivos conforme dispostos na tabela 2.6. Assim, E_g representa a diferença entre as energias E_c do fundo da banda de condução e $E_v + \Delta$ do topo da banda de valência,

$$E_v + \Delta = E_c - E_g . \quad (2.54)$$

Analogamente, o acoplamento Δ_c é dado em função da diferença entre as energias $E_v + \Delta$ e $(E_v + 2E_0)/3 + \Delta$ no topo da banda de valência,

$$\Delta_c = (E_v + \Delta) - \left[\frac{1}{3} (E_v + 2E_0) + \Delta \right] = \frac{2}{3} (E_v - E_0) . \quad (2.55)$$

O acoplamento spin-órbita Δ_{so} , por sua vez, é resultado da diferença entre a energia $(E_v + 2E_0)/3 + \Delta$ no topo e a energia $(2E_v + E_0)/3 - 2\Delta$ no fundo da banda de valência,

$$\Delta_{so} = \left[\frac{1}{3} (E_v + 2E_0) + \Delta \right] - \left[\frac{1}{3} (2E_v + E_0) - 2\Delta \right] = 3\Delta - \frac{1}{3} (E_v - E_0) . \quad (2.56)$$

Somando as equações (2.54) e (2.55), encontramos a relação

$$\frac{1}{3} (E_v + 2E_0) + \Delta = E_c - (E_g + \Delta_c) . \quad (2.57)$$

Similarmente, somando as equações (2.54)–(2.56), temos a igualdade

$$\frac{1}{3} (2E_v + E_0) - 2\Delta = E_c - (E_g + \Delta_c + \Delta_{so}) . \quad (2.58)$$

A importância das equações (2.54)–(2.58) está no fato de que conseguimos conectar as energias E_0 , E_v e Δ do nosso modelo aos gaps E_g , Δ_c e Δ_{so} , os quais dispomos de informações experimentais em inúmeras referências (52, 53). Note, portanto, que a matriz de Kane 8×8 para a monoestrutura de rede wurtzita na parametrização quase-cúbica (PqC) será escrita tendo em vista as energias dadas nas equações (2.54), (2.57) e (2.58). Entretanto, como mostra a equação (2.14) vinda do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, os elementos diagonais da matriz de Kane ainda incluem o termo cinético $\hbar^2 k^2 / 2m_0$, ou seja,

$$E_l = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \varepsilon_{l,0} , \quad (2.59)$$

onde $l = 1, 2, 3, \dots, 8$ e, segundo a tabela 2.6, cada energia $\varepsilon_{l,0}$ é duplamente degenerada, ou seja, $\varepsilon_{1,0} = \varepsilon_{2,0}$, $\varepsilon_{3,0} = \varepsilon_{6,0}$, $\varepsilon_{4,0} = \varepsilon_{5,0}$ e $\varepsilon_{7,0} = \varepsilon_{8,0}$, com

$$\varepsilon_{1,0} = E_c , \quad \varepsilon_{3,0} = E_v + \Delta , \quad \varepsilon_{5,0} = \frac{1}{3} (E_v + 2E_0) + \Delta , \quad \varepsilon_{7,0} = \frac{1}{3} (2E_v + E_0) - 2\Delta . \quad (2.60)$$

Se substituirmos (2.54), (2.57) e (2.58) na equação (2.60) e definirmos um novo índice l , tal que $l = 0, 1, 2, 3$, podemos reescrever a equação (2.59) em função de quatro novas energias duplamente degeneradas na forma

$$E_l = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + E_c - E_{gl} , \quad (2.61)$$

onde

$$E_{g0} = 0 , \quad E_{g1} = E_g , \quad E_{g2} = E_g + \Delta_c , \quad E_{g3} = E_g + \Delta_c + \Delta_{so} . \quad (2.62)$$

A energia E_c está livre de vínculos com parâmetros experimentais e, em particular, será escolhida sendo identicamente nula. Na seção 2.4.2 estudaremos uma particularidade da parametrização quase-cúbica que envolve a escolha do ângulo $\vartheta = 0$. A partir disso, traçaremos alguns paralelos com o espectro de sistemas cúbicos de rede zincblende.

2.4.2 A parametrização cúbica

Em particular, quando $\vartheta = 0$, ou seja, $\Delta_2 = \Delta_3 = \Delta$ e $\Delta_4 = 0$, então via equação (2.52) segue que $|z_+\rangle = |z\rangle$ e $|z_-\rangle = |z_c\rangle$ e os autovetores do sistema cúbico são completamente recobrados (42, 44). Assim, o caso $\vartheta = 0$ corresponde ao que chamaremos *parametrização cúbica* (PC). É bem instrutivo neste ponto traçar um paralelo entre os casos cúbico e hexagonal dados, respectivamente, por redes zincblende e wurtzita. Nos concentraremos nos autovalores de energia da soma de operadores $H_0 + H_{so}$ e sua relação com parâmetros da estrutura de bandas de ambos sistemas como o gap E_g , o *split-off* do campo cristalino Δ_c e o acoplamento spin-órbita Δ_{so} . Como dispomos de informações experimentais acerca destes parâmetros (52, 53), tentaremos relacioná-los com as energias ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 , além do acoplamento Δ . A tabela 2.7 mostra uma comparação entre os elementos de matriz de H_0 e H_{so} considerando os autoestados da interação spin-órbita na aproximação cúbica.

Tabela 2.7 – Projeção da soma $H_0 + H_{so}$ na base de autoestados da interação spin-órbita no contexto da parametrização cúbica (PC) para os sistemas cúbico e hexagonal. Aqui omitimos os estados classificados pelos índices $l = 2, 4, 6, 8$ uma vez que representam a degenerescência por spin no espectro de cada estrutura. Os gaps representam a diferença entre dois níveis de energia consecutivos. Neste âmbito, o nível de energia associado ao índice $l = 1$, ou seja, o fundo da banda de condução, é tomado como referência. As energias do sistema hexagonal de rede wurtzita podem ser obtidos tomando o caso $\vartheta = 0$ na equação (2.53).

	Cúbico	Cúbico	Hexagonal (PC)	
l	$\langle v_l H_0 v_l \rangle$	$\langle v_l H_0 + H_{so} v_l \rangle$	$\langle v_l H_0 + H_{so} v_l \rangle$	Gaps
1	E_c	E_c	$E_c = \epsilon_1$	0
3	E_v	$E_v + \Delta$	$E_v + \Delta$	E_g
5	E_v	$E_v + \Delta$	$\frac{1}{3}(E_v + 2\epsilon_2) + \Delta$	Δ_c
7	E_v	$E_v - 2\Delta$	$\frac{1}{3}(2E_v + \epsilon_2) - 2\Delta$	Δ_{so}

Além da energia cinética $\hbar^2 k^2 / 2m_0$ presente na equação (2.14) vinda do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, a tabela 2.7 mostra na quarta coluna os níveis de energia do hamiltoniano de Kane 8×8 do sistema hexagonal de rede wurtzita na parametrização cúbica. A última coluna desta tabela exhibe os três parâmetros experimentais E_g , Δ_c e Δ_{so} calculados como a diferença entre dois níveis de energia consecutivos. O gap E_g representa a energia entre a banda de

condução e o topo da banda de valência dada por

$$E_g = E_c - (E_v + \Delta) . \quad (2.63)$$

Por sua vez, o *split-off* do campo cristalino Δ_c define a abertura nas energias que caracterizam o topo da banda de valência, ou seja,

$$\Delta_c = (E_v + \Delta) - \left[\frac{1}{3} (E_v + 2\epsilon_2) + \Delta \right] = \frac{2}{3} (E_v - \epsilon_2) . \quad (2.64)$$

Finalmente, o acoplamento spin-órbita Δ_{so} é dado em função da diferença entre as energias da banda de valência de *split-off* do campo cristalino e o fundo da banda de valência,

$$\Delta_{so} = \left[\frac{1}{3} (E_v + 2\epsilon_2) + \Delta \right] - \left[\frac{1}{3} (2E_v + \epsilon_2) - 2\Delta \right] = 3\Delta - \frac{\Delta_c}{2} . \quad (2.65)$$

Na figura 2.7 ilustramos esquematicamente o *splitting* nas energias dos sistemas hexagonal e cúbico do ponto de vista das interações cinética H_0 e spin-órbita H_{so} . Note que a estrutura de bandas do semiconductor de rede cúbica não apresenta *splitting* devido a interação do campo cristalino Δ_c , característica inerente a rede hexagonal.

Figura 2.7 – Representação esquemática do *splitting* nas energias dos sistemas hexagonais e cúbico sob as interações cinética H_0 e spin-órbita H_{so} através dos resultados indicados na tabela 2.7.

Analisando a segunda coluna da tabela 2.7 e a figura 2.7, o operador H_0 não introduz *splitting* nas energias do topo da banda de valência do sistema cúbico. Ao contrário, a interação spin-órbita é responsável por abrir a degenerescência na banda de valência de maneira similar em ambos sistemas. Dada a equação (2.65), para o sistema hexagonal de

rede wurtzita temos $\Delta_{so} = 3\Delta - \Delta_c/2$. Se escolhermos $\Delta_c = 0$, então recobramos o caso cúbico onde $\Delta = \Delta_{so}/3$ (42, 44, 46). Mas caso $\Delta_c = 0$, ou seja, se não existir *splitting* nas energias do topo da banda de valência, então via equação (2.64) segue que $E_v = \epsilon_2$. Neste caso, a segunda e terceira colunas da tabela 2.7 tornam-se idênticas, ou seja, o espectro do sistema cúbico é perfeitamente recobrado a partir do sistema hexagonal. Este resultado tem uma consequência forte. Em linhas gerais, ambas parametrizações quase-cúbica e cúbica para a wurtzita fornecem um tratamento unificado dos sistemas hexagonal e cúbico. Uma vez que algumas estruturas semicondutoras se cristalizam intercalando as fases wurtzita e zinblende, este tratamento pode ser muito útil em sua descrição. Este é o caso, por exemplo, do politipismo e super-redes semicondutoras (9). Note ainda que, segundo a prescrição da parametrização cúbica, o *mixing* entre $|z_c\rangle$ e $|z\rangle$ através dos estados $|z_{\pm}\rangle$ dados em (2.52) pode ser completamente ignorado uma vez que $\vartheta = 0$.

2.4.3 O grupo duplo

Quando o acoplamento spin-órbita é levado em conta, o grupo de simetria do vetor de onda $\mathbf{k}$ no ponto Γ apresenta duas vezes mais elementos que o grupo pontual C_{6v} , motivo pelo qual passa a ser chamado grupo duplo. Além das representações irredutíveis do grupo C_{6v} , este grupo conta com as três representações extras Γ_7 , Γ_8 e Γ_9 . Estas representações, chamadas espinoriais, têm dimensão dois. Na tabela 2.8 apresentamos os caracteres das classes dentro de cada representação irredutível.

Tabela 2.8 – Caracteres das representações irredutíveis (RI) espinoriais Γ_7 e Γ_9 do grupo C_{6v} duplo. Aqui cada rotação se comporta como uma classe de equivalência. As classes de equivalência das reflexões C_5 e C_6 são dadas na seção 2.2.

RI	C_6^0	C_6^1	C_6^2	C_6^3	C_6^4	C_6^5	C_5	C_6
Γ_7	2	$\sqrt{3}$	1	0	-1	$-\sqrt{3}$	0	0
Γ_8	2	$-\sqrt{3}$	1	0	-1	$\sqrt{3}$	0	0
Γ_9	2	0	-2	0	2	0	0	0

Note que muito embora as simetrias de reflexão ainda estejam agrupadas em duas classes distintas no grupo C_{6v} duplo, cada rotação agora se comporta como uma classe independente. No espaço espinorial, as simetrias de rotação C_6^s são dadas por

$$\mathcal{D}_{1/2}^s = \begin{bmatrix} e^{-i\pi s/6} & 0 \\ 0 & e^{+i\pi s/6} \end{bmatrix}, \quad -\mathcal{D}_{1/2}^s = \begin{bmatrix} e^{+i\pi s/6} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi s/6} \end{bmatrix}, \quad (2.66)$$

onde $s \in (0, 1, 2, 3, 4, 5)$. Analogamente, as simetrias de reflexão σ_s são resumidas no par de matrizes

$$\mathcal{R}_{1/2}^s = \begin{bmatrix} 0 & e^{-i\pi s/6} \\ e^{+i\pi s/6} & 0 \end{bmatrix}, \quad -\mathcal{R}_{1/2}^s = \begin{bmatrix} 0 & e^{+i\pi s/6} \\ e^{-i\pi s/6} & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.67)$$

Uma pergunta que deve ser respondida agora se refere à forma como estas novas representações irredutíveis estão relacionadas às bandas condução e valência que encontramos na seção 2.4.1.

Conforme mostrado na tabela 2.6, já sabemos como os autovetores da interação spin-órbita estão relacionados aos autovalores da soma de operadores $H_0 + H_{so}$. Apenas para relembrar, estas energias estão diretamente ligadas aos gaps $(E_g, \Delta_c, \Delta_{so})$ da estrutura de bandas da wurtzita. Nossa proposta será calcular o caracter (o traço da matriz associada a um dado elemento do grupo) da representação matricial resultante da projeção dos elementos $C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s$ e $\sigma_s \mathcal{R}_{1/2}^s$ na base de autoestados da interação spin-órbita. Mantendo a coerência do texto, estaremos tratando sempre da parametrização quase-cúbica onde os autoestados de H_{so} são dados na tabela 2.6. Em particular, usaremos o ordenamento dos vetores da base na forma

$$\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle, |v_6\rangle, |v_4\rangle, |v_5\rangle, |v_7\rangle, |v_8\rangle\}. \quad (2.68)$$

Se o leitor voltar à tabela 2.6 recordará que os vetores $|v_l\rangle$, $l = 1, 2, \dots, 8$, são funções da combinação linear $|x\rangle \pm i|y\rangle$ e dos estados de spin $|\pm\rangle$ do operador σ_z . Assim, será mais fácil resolver o problema se determinarmos a ação dos operadores $C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s$ e $\sigma_s \mathcal{R}_{1/2}^s$ em cada um destes termos. Devemos lembrar que as matrizes em (2.66) e (2.67) têm sua ação reduzida aos autoestados do espaço espinorial. Começando pela projeção das

matrizes $\mathcal{D}_{1/2}^s$ e $\mathcal{R}_{1/2}^s$ nos estados de spin $|\pm\rangle$, temos

$$\mathcal{D}_{1/2}^s |\pm\rangle = e^{\mp i\pi s/6} |\pm\rangle, \quad \mathcal{R}_{1/2}^s |\pm\rangle = e^{\pm i\pi s/6} |\mp\rangle. \quad (2.69)$$

Através dos resultados da seção 2.2, podemos calcular a ação das matrizes de rotação C_6^s e reflexão σ_s nos estados de posição $|x\rangle$ e $|y\rangle$,

$$C_6^s (|x\rangle \pm i|y\rangle) = e^{\mp i2\pi s/6} (|x\rangle \pm i|y\rangle), \quad \sigma_s (|x\rangle \pm i|y\rangle) = -e^{\pm i2\pi s/6} (|x\rangle \mp i|y\rangle). \quad (2.70)$$

Agora podemos combinar as equações (2.69) e (2.70) de modo a obter a ação dos elementos $C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s$ e $\sigma_s \mathcal{R}_{1/2}^s$ em cada um dos quatro produtos tensoriais $(|x\rangle \pm i|y\rangle) \otimes |\pm\rangle$ e $(|x\rangle \pm i|y\rangle) \otimes |\mp\rangle$, ou seja,

$$C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s (|x\rangle \pm i|y\rangle) \otimes |\pm\rangle = e^{\mp i\pi s/2} (|x\rangle \pm i|y\rangle) \otimes |\pm\rangle, \quad (2.71)$$

$$C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s (|x\rangle \pm i|y\rangle) \otimes |\mp\rangle = e^{\mp i\pi s/6} (|x\rangle \pm i|y\rangle) \otimes |\mp\rangle, \quad (2.72)$$

$$\sigma_s \mathcal{R}_{1/2}^s (|x\rangle \pm i|y\rangle) \otimes |\pm\rangle = -e^{\pm i\pi s/2} (|x\rangle \mp i|y\rangle) \otimes |\mp\rangle, \quad (2.73)$$

$$\sigma_s \mathcal{R}_{1/2}^s (|x\rangle \pm i|y\rangle) \otimes |\mp\rangle = -e^{\pm i\pi s/6} (|x\rangle \mp i|y\rangle) \otimes |\pm\rangle. \quad (2.74)$$

Estas equações são a chave para a projeção dos elementos $C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s$ e $\sigma_s \mathcal{R}_{1/2}^s$ nos estados $|v_l\rangle$. Seguindo o ordenamento da base dado em (2.68) a representação matricial do operador $C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s$ na base de estados da interação spin-órbita é

$$C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s = \begin{bmatrix} F_1 & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} \\ 0_{2 \times 2} & F_2 & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} \\ 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & F_1 & 0_{2 \times 2} \\ 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & F_1 \end{bmatrix}, \quad (2.75)$$

onde $0_{2 \times 2}$ define aqui uma matriz de dimensão 2×2 com todas as entradas nulas e as matrizes F_1 e F_2 são

$$F_1 = \begin{bmatrix} e^{-i\pi s/6} & 0 \\ 0 & e^{+i\pi s/6} \end{bmatrix}, \quad F_2 = \begin{bmatrix} e^{-i\pi s/2} & 0 \\ 0 & e^{+i\pi s/2} \end{bmatrix}. \quad (2.76)$$

Por um processo exatamente similar, a projeção de $\sigma_s \mathcal{R}_{1/2}^s$ nos autoestados de H_{so} sob o

âmbito da parametrização quase-cúbica resulta na matriz

$$\sigma_s \mathcal{R}_{1/2}^s = \begin{bmatrix} F_3 & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} \\ 0_{2 \times 2} & F_4 & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} \\ 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & F_3 & 0_{2 \times 2} \\ 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & -F_3 \end{bmatrix}, \quad (2.77)$$

onde as matrizes F_3 e F_4 são

$$F_3 = \begin{bmatrix} 0 & e^{+i\pi s/6} \\ e^{-i\pi s/6} & 0 \end{bmatrix}, \quad F_4 = \begin{bmatrix} 0 & e^{+i\pi s/2} \\ e^{-i\pi s/2} & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.78)$$

Levando em conta todos os valores do índice s , o próximo passo consiste em calcular o traço de cada bloco matricial F_i e, em seguida, verificar sua compatibilidade com os caracteres de cada classe nas representações irredutíveis espinoriais Γ_7 , Γ_8 e Γ_9 . O traço dos blocos F_3 e F_4 relativos às simetrias de reflexão é identicamente nulo e, portanto, não ajuda muito neste paralelo. Resta então o traço dos blocos F_1 e F_2 ligados às rotações,

$$\text{Tr}(F_1) = 2 \cos\left(\frac{\pi s}{6}\right), \quad \text{Tr}(F_2) = 2 \cos\left(\frac{\pi s}{2}\right). \quad (2.79)$$

Dada a equação (2.79), a tabela 2.9 mostra o valor do traço das matrizes F_1 e F_2 para cada valor do índice s . Olhando a segunda e terceira colunas desta tabela é possível identificar

Tabela 2.9 – Traço das matrizes F_1 , $\text{Tr}(F_1) = 2 \cos(\pi s/6)$, e F_2 , $\text{Tr}(F_2) = 2 \cos(\pi s/2)$, para os valores $s \in (0, 1, 2, \dots, 5)$. Analisando a segunda e terceira colunas da tabela é possível relacionar os traços aos caracteres dos elementos de rotação e reflexão dentro de cada classe das representações irredutíveis (RI) espinoriais Γ_7 e Γ_9 do grupo C_{6v} duplo.

s	$\text{Tr}(F_1)$	$\text{Tr}(F_2)$
0	0	+2
1	$+\sqrt{3}$	0
2	+1	-2
3	0	0
4	-1	+2
5	$-\sqrt{3}$	0
RI	Γ_7	Γ_9

os caracteres das classes das representações irredutíveis espinoriais Γ_7 e Γ_9 fornecidos na tabela 2.8. Mais que isso, uma vez que o primeiro bloco F_1 em (2.75) vem da projeção de $C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s$ nos estados $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$, a energia da banda de condução está associada com a

representação espinorial Γ_7 . Por um raciocínio análogo, a banda de valência de *split-off* do campo cristalino e o fundo da banda de valência também se comportam segundo Γ_7 já que o terceiro e quarto blocos em (2.75) dados por F_1 surgem da projeção de $C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s$ nos estados $\{|v_4\rangle, |v_5\rangle, |v_7\rangle, |v_8\rangle\}$. Por fim, dado que o bloco F_2 emerge da projeção das simetrias de rotação do grupo duplo nos estados $\{|v_3\rangle, |v_6\rangle\}$, as energias no topo da banda de valência se transformam segundo a representação espinorial Γ_9 . A disposição da estrutura de bandas com base nesta hierarquia das representações irreduzíveis é chamada *ordenação normal* (46). Há casos, entretanto, em que a disposição destas representações no topo da banda de valência pode se inverter. Mais precisamente, o topo da banda de valência pode se comportar segundo Γ_7 ao invés de Γ_9 e a banda de valência de *split-off* do campo cristalino se transformar como Γ_9 ao invés de Γ_7 . Este é o chamado *ordenamento anômalo*. Pictoricamente, podemos então esquematizar estes dois casos como

$$C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s \sim \begin{bmatrix} \Gamma_7 & & & \\ & \Gamma_9 & & \\ & & \Gamma_7 & \\ & & & \Gamma_7 \end{bmatrix}, \quad \text{ou} \quad C_6^s \mathcal{D}_{1/2}^s \sim \begin{bmatrix} \Gamma_7 & & & \\ & \Gamma_7 & & \\ & & \Gamma_9 & \\ & & & \Gamma_7 \end{bmatrix}. \quad (2.80)$$

Este resultado pode ser checado via decomposição do momento angular. As simetrias do grupo duplo advém da inclusão do grau de liberdade de spin ao elétron, ou seja, $j = 1/2$. Assim, a representação irreduzível Γ_7 para a banda de condução resulta do produto $A_1 \otimes \mathcal{D}_{1/2}^s = \Gamma_7$. Da mesma forma, as representações espinoriais Γ_7 e Γ_9 na banda de valência surgem do produto $A_2 \otimes \mathcal{D}_{1/2}^s = \Gamma_7 \oplus \Gamma_9$ (50).

2.5 A matriz de Kane com oito bandas

Para concluir a construção da matriz de Kane 8×8 resta agora determinar a projeção do hamiltoniano H_{kp} dado em (2.29) na base de autoestados da interação spin-órbita

fornecida na tabela 2.6. Note que todos os cálculos desenvolvidos aqui levarão em conta os resultados vindos da parametrização quase-cúbica e, por conveniência, seguiremos o ordenamento dos estados da base na forma

$$\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle, |v_6\rangle, |v_4\rangle, |v_5\rangle, |v_7\rangle, |v_8\rangle\} . \quad (2.81)$$

Como pode ser visto na equação (2.29), o hamiltoniano H_{kp} se divide em duas interações, a saber, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e spin-órbita. Em outras palavras, dados $j, l \in \{1, 2, \dots, 8\}$ com $j = l$ ou $j \neq l$, partindo dos estados arbitrários $|v_j\rangle$ e $|v_l\rangle$ pertencentes à base indicada na equação (2.81), desejamos calcular o elemento de matriz

$$\langle v_j | H_{kp} | v_l \rangle = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \langle v_j | \mathbf{p} | v_l \rangle + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \mathbf{k} \cdot \langle v_j | \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r}) | v_l \rangle . \quad (2.82)$$

Muito embora estas duas interações sejam pequenas, a interação spin-órbita é ainda bem menor (31–33). Além do mais, os efeitos da interação spin-órbita já foram devidamente levados em conta ao determinarmos a base de autoestados na parametrização quase-cúbica indicada na tabela 2.6. Neste sentido, a presença da interação spin-órbita em (2.82) corresponde a uma correção em segunda ordem que aqui desprezaremos totalmente. Restam, portanto, os elementos de matriz da interação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ usual que, assim como nas seções 2.3 e 2.4, serão calculados explorando as simetrias das representações irredutíveis associadas ao operador momentum linear $\mathbf{p}$ e aos estados $\{|z_c\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$.

O operador momentum linear se transforma segundo a soma direta $E_1 \oplus A_1$, ou seja, enquanto as componentes p_x e p_y do operador momentum linear no plano se transformam segundo a representação irredutível vetorial E_1 , a componente p_z se comporta como um escalar transformando-se de acordo com as simetrias da representação identidade A_1 do grupo pontual C_{6v} . Como já sabido, os estados $\{|z_c\rangle, |z\rangle\}$ também compartilham da simetria escalar A_1 , ao passo que $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ se transformam como E_1 . Uma vez que os autovetores da interação spin-órbita dados na tabela 2.6 dependem destes estados, herdam portanto as suas simetrias. Em particular, esquecendo por um momento a presença dos estados de spin $|\pm\rangle$, os estados $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$ se transformam segundo a representação escalar A_1 enquanto os estados $\{|v_3\rangle, |v_6\rangle\}$ se comportam de acordo com a representação

vetorial E_1 . Por outro lado, assim como o momentum linear $\mathbf{p}$, o conjunto de estados $\{|v_4\rangle, |v_5\rangle, |v_7\rangle, |v_8\rangle\}$ se transformam segundo a representação $A_1 \oplus E_1$.

Via o teorema do apêndice A, se o produto direto das representações irredutíveis associadas aos estados da base $\{|z_c\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$ e ao operador $\mathbf{p}$ não apresenta a representação identidade A_1 do grupo pontual C_{6v} , então todos os elementos de matriz de $\mathbf{p}$ se anulam por razões de simetria. Ademais, o número de elementos de matriz não-nulos é igual a multiplicidade da representação escalar A_1 numa dada decomposição.

Tabela 2.10 – Elementos de matriz do operador momentum linear $\mathbf{p}$ na base $\{|z_c\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$, onde $|z_c\rangle$ representa a banda de condução com simetria escalar A_1 , $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ indicam o topo da banda de valência com simetria vetorial E_1 e $|z\rangle$ descreve a banda de *split-off* do campo cristalino também com simetria A_1 . Aqui $\{i, j, k\} \in \{1, 2\}$, com $x_1 = x$, $x_2 = y$, $p_1 = p_x$, $p_2 = p_y$ e $p_3 = p_z$. Note ainda que o operador $\mathbf{p}$ se transforma segundo a representação $A_1 \oplus E_1$. Como pode ser visto, os elementos π_0 , π_4 e π_5 se anulam via simetria de reversão temporal (SRT).

Elementos de matriz	Produtos diretos
$\langle z_c p_i z_c \rangle = 0$	$A_1 \otimes E_1 \otimes A_1 = E_1$
$\langle z_c p_z z_c \rangle = \pi_0$ ($\rightarrow 0$ por SRT)	$A_1 \otimes A_1 \otimes A_1 = A_1$
$\langle z_c p_i x_i \rangle = \pi_1$	$A_1 \otimes E_1 \otimes E_1 = A_1 \oplus A_2 \oplus E_2$
$\langle z_c p_i x_j \rangle = 0$	$A_1 \otimes E_1 \otimes E_1 = A_1 \oplus A_2 \oplus E_2$
$\langle z_c p_i z \rangle = 0$	$A_1 \otimes E_1 \otimes A_1 = E_1$
$\langle z_c p_z x_i \rangle = 0$	$A_1 \otimes A_1 \otimes E_1 = E_1$
$\langle z_c p_z z \rangle = \pi_2$	$A_1 \otimes A_1 \otimes A_1 = A_1$
$\langle x_i p_j x_k \rangle = 0$	$E_1 \otimes E_1 \otimes E_1 = B_1 \oplus B_2 \oplus 3E_1$
$\langle x_i p_i z \rangle = \pi_3$	$E_1 \otimes E_1 \otimes A_1 = A_1 \oplus E_2 \oplus A_2$
$\langle x_j p_i z \rangle = 0$	$E_1 \otimes E_1 \otimes A_1 = A_1 \oplus E_2 \oplus A_2$
$\langle x_i p_z x_i \rangle = \pi_4$ ($\rightarrow 0$ por SRT)	$E_1 \otimes A_1 \otimes E_1 = A_1 \oplus E_2 \oplus A_2$
$\langle x_i p_z z \rangle = 0$	$E_1 \otimes A_1 \otimes A_1 = E_1$
$\langle z p_z z \rangle = \pi_5$ ($\rightarrow 0$ por SRT)	$A_1 \otimes A_1 \otimes A_1 = A_1$

Na tabela 2.10 reunimos de maneira geral os principais elementos de matriz do operador $\mathbf{p}$. Observe que há cinco elementos independentes não-nulos. Em particular, π_0 representa o acoplamento entre os estados da própria banda de condução, ao passo que π_1 está ligado ao acoplamento entre os estados do topo da banda de valência e da banda de condução. Enquanto o parâmetro π_2 define o acoplamento entre a banda de condução e o fundo da banda de valência, π_3 acopla os estados do topo e do fundo da banda de valência. Por outro lado, π_4 e π_5 se associam a acoplamentos intrabanda de valência. Note que embora o produto tensorial das representações irredutíveis nos elementos de matriz $\langle z_c | p_i | x_j \rangle$ e $\langle x_j | p_i | z \rangle$ mostrados na tabela 2.10 apresente a identidade A_1 , estes são

identicamente nulos. Para entender este fato, vamos atuar os elementos de simetria do grupo pontual C_{6v} em cada um destes termos. Em particular, uma vez que as componentes p_x e p_y do operador momentum linear no plano se transformam segundo a representação vetorial E_1 , a matriz de reflexão σ_{d1} será muito útil uma vez que

$$\sigma_{d1} p_x \sigma_{d1}^{-1} = -p_x, \quad \sigma_{d1} p_y \sigma_{d1}^{-1} = p_y, \quad \sigma_{d1} |x\rangle = -|x\rangle, \quad \sigma_{d1} |y\rangle = |y\rangle. \quad (2.83)$$

Como os estados $\{|z_c\rangle, |z\rangle\}$ se transformam segundo a representação identidade A_1 , são invariantes a ação de qualquer elemento de simetria do grupo pontual C_{6v} . Desta forma, vamos tomar como exemplo o elemento de matriz onde $(i, j) = (1, 2)$, ou seja,

$$\langle z_c | p_x | y \rangle = \langle z_c | \sigma_{d1}^{-1} (\sigma_{d1} p_x \sigma_{d1}^{-1}) \sigma_{d1} | y \rangle = -\langle z_c | p_x | y \rangle. \quad (2.84)$$

Dado que o mesmo raciocínio se aplica ao caso $(i, j) = (2, 1)$, este resultado justifica portanto a identidade $\langle z_c | p_i | x_j \rangle = 0$. Mais ainda, como $|z_c\rangle$ e $|z\rangle$ compartilham da mesma simetria, tudo se passa da mesma forma para o elemento de matriz $\langle x_j | p_i | z \rangle = 0$.

Mas, agora que recorremos a decomposições do produto direto das representações irredutíveis relativas aos estados da base e ao operador momentum linear $\mathbf{p}$, existe mais alguma simetria que nos permita reduzir o número de parâmetros independentes π_l ? Aliás, os coeficientes π_l são reais ou complexos? Analogamente ao que fizemos na seção 2.4, para responder a estas questões dispomos da simetria de reversão temporal (SRT) (40, 50). Uma vez que estamos lidando com os estados $\{|z_c\rangle, |x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$ na ausência dos autoestados de spin $|\pm\rangle$ do operador σ_z , o operador de reversão temporal assume a forma $K = C$, onde C define o conjugado complexo. Sob ação do operador K o momentum linear $\mathbf{p}$ muda de sinal, $K \mathbf{p} K^{-1} = -\mathbf{p}$. Para encurtar os cálculos, vamos inicialmente tomar o elemento de matriz $\langle z_c | p_z | z_c \rangle$ para exemplificar o uso da reversão temporal no seu cálculo,

$$\langle z_c | p_z | z_c \rangle = (K \langle z_c |) (K p_z^\dagger K^{-1}) (K | z_c \rangle). \quad (2.85)$$

Através do *critério de Herring* (15, 30, 50) todas as representações irredutíveis do grupo pontual C_{6v} são reais e, portanto, invariantes sob ação do operador reversão temporal $K = C$, ou seja, $C | z_c \rangle = | z_c \rangle$. Como p_z é um operador hermiteano e $K p_z K^{-1} = -p_z$,

então

$$\langle z_c | p_z | z_c \rangle = -\langle z_c | p_z | z_c \rangle . \quad (2.86)$$

Dado que esta equação é satisfeita apenas se $\langle z_c | p_z | z_c \rangle = 0$, então o acoplamento π_0 é identicamente nulo. O mesmo raciocínio também é válido para π_4 e π_5 , ou seja, $\pi_4 = 0$ e $\pi_5 = 0$. Isto acontece uma vez que $\{|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$ se transformam segundo as representações reais do grupo pontual C_{6v} . Agora resta saber se podemos tirar alguma informação dos demais acoplamentos ainda via a simetria de reversão temporal. Para isso, seja o elemento de matriz

$$\langle z_c | p_i | x_i \rangle = (K \langle x_i |) (K p_i^\dagger K^{-1}) (K | z_c \rangle) , \quad (2.87)$$

onde $i \in \{1, 2\}$, com $x_1 = x$, $x_2 = y$, $p_1 = p_x$ e $p_2 = p_y$. Novamente, já que todas as representações irredutíveis são invariantes sob ação do operador reversão temporal por serem reais, então como p_i é um operador hermiteano e $K p_i K^{-1} = -p_i$, então

$$\langle z_c | p_i | x_i \rangle = -\langle x_i | p_i | z_c \rangle = -\langle z_c | p_i | x_i \rangle^* . \quad (2.88)$$

Esta equação nos permite concluir que o elemento de matriz $\langle z_c | p_i | x_i \rangle$ é um número puramente imaginário, isto é, $\pi_1^* = -\pi_1$. Logicamente, o mesmo acontece com os acoplamentos π_2 e π_3 , ou seja, $\pi_2^* = -\pi_2$ e $\pi_3^* = -\pi_3$. Contrariamente ao que se observa aqui, o parâmetro π_3 associado ao acoplamento intrabanda de valência promovido pelo operador momentum linear pode ser escolhido igual a zero em sistemas cúbicos via a simetria de reversão temporal. Aqui eliminaremos este termo embasados pela segunda hipótese de Kane (46): π_3 é suficientemente pequeno tal que pode ser desprezado sem perda de generalidade.

Sabendo que apenas os elementos de matriz descritos pelos acoplamentos π_1 e π_2 são diferentes de zero, resta calcular a projeção do hamiltoniano H_{kp} nos autoestados na interação spin-órbita escritos no âmbito da parametrização quase-cúbica dada na tabela 2.6. Para tanto, vamos dar três exemplos deste cálculo mostrando como surgem os parâmetros de Kane P_1 e P_2 . Uma vez que $\langle x_i | p_z | z_\pm \rangle = 0$ e também $\langle x | p_y | z_\pm \rangle = \langle y | p_x | z_\pm \rangle = 0$ já que

os estados $|z_{\pm}\rangle$ dados em (2.52) carregam as simetrias de $|z_c\rangle$ e $|z\rangle$, então

$$\langle v_3|H_{kp}|v_1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{i\hbar}{m_0}\pi_1^*(k_x - ik_y)\cos\vartheta = -\frac{1}{\sqrt{2}}P_1\cos\vartheta k_- , \quad (2.89)$$

onde $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ e definimos o parâmetro de Kane

$$P_1 = -\frac{i\hbar}{m_0}\pi_1 . \quad (2.90)$$

Analogamente a este caso, o mesmo raciocínio se aplica para o elemento de matriz

$$\langle v_4|H_{kp}|v_3\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{i\hbar}{m_0}\pi_1(k_x + ik_y)\sin\vartheta = -i\frac{1}{\sqrt{3}}P_1\sin\vartheta k_+ . \quad (2.91)$$

Curiosamente, como a parametrização quase-cúbica está ligada à presença dos termos $\sin\vartheta$ e $\cos\vartheta$, podemos definir dois novos parâmetros de Kane a partir de P_1 . Assim,

$$\bar{P}_1 = P_1\cos\vartheta , \quad \tilde{P}_1 = P_1\sin\vartheta . \quad (2.92)$$

Naturalmente, se tomarmos o caso $\vartheta = 0$ onde $\bar{P}_1 = P_1$ e $\tilde{P}_1 = 0$, recobramos imediatamente o caso cúbico. Utilizando estas definições, os elementos de matriz em (2.89) e (2.91) são reescritos na forma

$$\langle v_3|H_{kp}|v_1\rangle = -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{2}}k_- , \quad \langle v_4|H_{kp}|v_3\rangle = -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_+ . \quad (2.93)$$

Para concluir, dado que $\langle z_c|p_z|z_c\rangle = \langle z|p_z|z\rangle = 0$ e $\langle z_c|p_z|z\rangle = \pi_2$, segue portanto o elemento de matriz do hamiltoniano H_{kp}

$$\langle v_4|H_{kp}|v_3\rangle = i\frac{2}{\sqrt{6}}\frac{\hbar}{m_0}\left(\pi_2^*\sin^2\vartheta - \pi_2\cos^2\vartheta\right)k_z = \frac{2P_2}{\sqrt{6}}k_z , \quad (2.94)$$

onde definimos o novo parâmetro de Kane

$$P_2 = -\frac{i\hbar}{m_0}\pi_2 . \quad (2.95)$$

Adianto ao leitor que todos os demais elementos de matriz são calculados seguindo este mesmo procedimento, lembrando sempre dos parâmetros de Kane $\bar{P}_1$, $\tilde{P}_1$ e P_2 definidos, respectivamente, nas equações (2.92) e (2.95), além de todos os elementos de matriz do operador momentum linear listados na tabela 2.10 e dos autoestados da interação spin-órbita sob a parametrização quase-cúbica presentes na tabela 2.6. Com um pouco de

paciência, após desenvolver todos os cálculos, a representação matricial do hamiltoniano H_{kp} na base de estados do operador H_{so} resulta em

$$H_{kp} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{2}}k_+ & \frac{2P_2}{\sqrt{6}}k_z & \frac{\bar{P}_1}{\sqrt{6}}k_- & 0 & -\frac{P_2}{\sqrt{3}}k_z & -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{3}}k_- \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ & \frac{2P_2}{\sqrt{6}}k_z & \frac{\bar{P}_1}{\sqrt{2}}k_- & -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{3}}k_+ & \frac{P_2}{\sqrt{3}}k_z \\ \hline -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{2}}k_- & 0 & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_- & 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_- & 0 \\ \frac{2P_2}{\sqrt{6}}k_z & -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{6}}k_- & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_+ & 0 & i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_- & 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_- \\ \frac{\bar{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ & \frac{2P_2}{\sqrt{6}}k_z & 0 & -i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_+ & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_- & -i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_+ & 0 \\ 0 & \frac{\bar{P}_1}{\sqrt{2}}k_+ & 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_+ & 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ \\ -\frac{P_2}{\sqrt{3}}k_z & -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{3}}k_- & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_- & 0 & 0 & i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_- \\ -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ & \frac{P_2}{\sqrt{3}}k_z & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_+ & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_- & -i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_+ & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.96)$$

Note que se $\vartheta = 0$, então o bloco 6×6 desta matriz se torna identicamente nulo. Conforme conduzimos os cálculos, a representação matricial da soma de operadores $H_0 + H_{so}$ é diagonal

$$H_0 + H_{so} = \text{diag}(E_0, E_0, E_1, E_1, E_2, E_2, E_3, E_3), \quad (2.97)$$

onde as energias E_l , $l \in (0, 1, 2, 3)$, são dadas na equação (2.61). Então o hamiltoniano de Kane 8×8 dado em (2.26) para a monoestrutura semicondutora pode ser imediatamente calculado somando as equações (2.96) e (2.97), ou seja,

$$H = \begin{bmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_v \end{bmatrix}. \quad (2.98)$$

Aqui, H_c representa uma matriz de dimensão 2×2 proporcional a matriz identidade com características exclusivas da banda de condução,

$$H_c = E_0 \mathbb{1}_{2 \times 2}. \quad (2.99)$$

O bloco H_{cv} é definido em termos de uma matriz linha 2×6 , ligada aos acoplamentos entre as bandas de condução e valência,

$$H_{cv} = \begin{bmatrix} -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{2}}k_+ & \frac{2P_2}{\sqrt{6}}k_z & \frac{\bar{P}_1}{\sqrt{6}}k_- & 0 & -\frac{P_2}{\sqrt{3}}k_z & -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{3}}k_- \\ 0 & -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ & \frac{2P_2}{\sqrt{6}}k_z & \frac{\bar{P}_1}{\sqrt{2}}k_- & -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{3}}k_+ & \frac{P_2}{\sqrt{3}}k_z \end{bmatrix}. \quad (2.100)$$

Por fim, H_v é dado em termos de uma matriz quadrada hermitiana de dimensão 6×6 com influências diretas da banda de valência,

$$H_v = \begin{bmatrix} E_1 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_- & 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_- & 0 \\ -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_+ & E_1 & i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_- & 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_- \\ 0 & -i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_+ & E_2 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_- & -i\frac{P_1}{3\sqrt{2}}k_+ & 0 \\ 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_+ & E_2 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ \\ i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_- & 0 & E_3 & i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_- \\ 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_+ & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_- & -i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_+ & E_3 \end{bmatrix}. \quad (2.101)$$

Caso $\vartheta = 0$, observe que o bloco H_v assume um caráter inteiramente diagonal, isto é, $H_v = \text{diag}(E_1, E_1, E_2, E_2, E_3, E_3)$.

No capítulo 3 mostraremos como encontrar a equação efetiva associada a um elétron na banda de condução de semicondutores de rede wurtzita a partir do hamiltoniano de Kane 8×8 dado em (2.98). Ficará mais claro o motivo de representarmos este hamiltoniano na forma de blocos matriciais como exposto aqui. Em especial, os cálculos serão desenvolvidos de tal maneira a abordar tanto a heteroestrutura quanto o semicondutor na fase *bulk*.

2.6 A matriz de Kane em heteroestruturas

Conforme dito na seção 1.1, uma junção ou heteroestrutura semicondutora é formada em geral por materiais diferentes. A mais simples delas, o poço quântico, é caracterizada pelo arranjo em série de três semicondutores crescidos na direção do eixo z . Em particular, o semicondutor central possui gap de energia bem menor quando comparado aos demais. Como na interface entre estes materiais surgem descontinuidades devido suas diferentes características físicas, a periodicidade do sistema é quebrada na direção z e não podemos utilizar o teorema de Bloch (47) e a função $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ dada em (2.11) para descrever seus autoestados eletrônicos. Tendo em mente estes fatos, a extensão mais simples do caso *bulk*

para a heteroestrutura se fundamenta em algumas hipóteses (57). Em primeiro lugar, admitiremos que as funções de Luttinger-Kohn $u_{l,0}(\mathbf{r})$ são idênticas para os diferentes semicondutores que compõem cada camada da junção, ou seja, os materiais compartilham a mesma estrutura cristalográfica. Além de ortogonais e bem localizadas, estas funções oscilam rapidamente na cela unitária. Embora a heteroestrutura tenha sua periodicidade quebrada na direção z de crescimento, ainda é invariante via simetria de translação no plano xy . Ademais, os coeficientes $a_{n,l}(\mathbf{k})$ dados em (2.10) devem ser substituídos pelas funções $f_l(\mathbf{r})$ que variam lentamente na rede de Bravais. Estas funções formam um envelope que modula as oscilações dos estados $u_{l,0}(\mathbf{r})$ na cela unitária (58). A função de onda eletrônica na heteroestrutura é então dada por

$$\Psi = \sum_{l=1}^N f_l(\mathbf{r}) u_{l,0}(\mathbf{r}) . \quad (2.102)$$

Esta generalização do caso *bulk* para a heteroestrutura é conhecida como Aproximação das Funções Envelope (EFA - *Envelope Function Approximation*) (56). Por simplicidade, omitimos a dependência do estado Ψ em relação ao vetor de onda $\mathbf{k}$, muito embora saibamos que ela existe e depende do tipo de semicondutor presente na junção. A soma no índice l na equação (2.102) deveria, em princípio, compreender todas as bandas de energia do sistema. Na prática, ela será truncada no número de oito estados que usamos no caso *bulk* cujos efeitos de interação podem ser tratados exatamente.

Na prescrição da aproximação das funções envelope, a integral do produto de uma função $f_l(\mathbf{r})$ variando lentamente na rede de Bravais de volume Ω e uma função $u_{l,0}(\mathbf{r})$ oscilando rapidamente na cela unitária de volume Ω_0 pode ser reescrita em termos do produto de duas integrais, uma para cada função, a saber,

$$\int_{\Omega} d^3\mathbf{r} u_{l,0}(\mathbf{r}) f_l(\mathbf{r}) \approx \left[\frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} d^3\mathbf{r} u_{l,0}(\mathbf{r}) \right] \left[\int_{\Omega} d^3\mathbf{r} f_l(\mathbf{r}) \right] . \quad (2.103)$$

Este resultado possui uma correção em primeira ordem proporcional ao gradiente da função envelope $f_l(\mathbf{r})$ dada pela expressão

$$\delta \approx \left[\frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} d^3\mathbf{r} u_{l,0}(\mathbf{r}) \mathbf{r} \right] \cdot \left[\int_{\Omega} d^3\mathbf{r} \nabla f_l(\mathbf{r}) \right] . \quad (2.104)$$

Note que o erro δ será tão menor quanto mais lentamente variar a função $f_l(\mathbf{r})$. Utili-

zando a identidade apresentada na equação (2.103), pode ser mostrado que a projeção do hamiltoniano de Kane dado em (2.8) na base das funções envelope (2.102) é escrita na forma (41)

$$\sum_{l=1}^N \left\{ \left[\varepsilon_{l,0}(\mathbf{r}) - E - \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \right] \delta_{s,l} - i \frac{\hbar}{m_0} \langle s|\pi|l \rangle \cdot \nabla \right\} f_l(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.105)$$

onde $H\Psi = E\Psi$, $\langle \mathbf{r}|l \rangle = u_{l,0}(\mathbf{r})$, $Hu_{l,0}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{l,0}(\mathbf{r}) u_{l,0}(\mathbf{r})$ e o elemento de matriz $\langle s|\pi|l \rangle$ está definido na equação (2.15). Já que a simetria de translação no plano xy é preservada na heteroestrutura, enquanto as componentes do vetor de onda no plano $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$ definem números quânticos, a componente k_z passa a se comportar como um operador diferencial, ou seja, $k_z = -id/dz$, e a equação (2.105) é reescrita como

$$\sum_{l=1}^N \left\{ \left[\varepsilon_{l,0}(z) - E + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dz^2} \right] \delta_{s,l} + \frac{\hbar}{m_0} \langle s|\pi|l \rangle \cdot \left(\mathbf{k}_{\parallel} - i\hat{z} \frac{d}{dz} \right) \right\} f_l(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.106)$$

Comparando as equações (2.14) e (2.106), além da componente k_z do vetor de onda que agora é um operador, a aproximação das funções envelope torna as energias $\varepsilon_{l,0}(z)$ dependentes da posição ao longo da direção z para compreender as interfaces presentes na heteroestrutura. Neste sentido, a matriz de Kane neste sistema é dada pela equação (2.98) tendo em vista que $k_z = -id/dz$ e que as energias (E_0, E_1, E_2, E_3) na diagonal principal devem ser modificadas para incluir a dependência na coordenada z , a saber,

$$E_l = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + E_c + V_l(z) - E_{g_l}, \quad (2.107)$$

onde $l \in (0, 1, 2, 3)$, $V_l(z) = V_H(z) + \nu_l(z)$ e ainda

$$E_{g0} = 0, \quad E_{g1} = E_g, \quad E_{g2} = E_g + \Delta_c, \quad E_{g3} = E_g + \Delta_c + \Delta_{so}. \quad (2.108)$$

Aqui $V_H(z)$ define o potencial de Hartree na aproximação de um elétron que, por sua vez, pode ser entendido como a soma entre o potencial devido a estes portadores no poço quântico caracterizado pela heteroestrutura e o potencial externo devido a *gates* e regiões dopantes. Os potenciais $\nu_l(z)$ definem o poço quântico e eventuais barreiras contidas nele. Para encerrar, recomendamos ao leitor consultar as referências (41, 43, 56) para maiores discussões sobre a aproximação das funções envelope.

2.7 A comparação com Chuang & Chang

Nesta seção vamos comparar a matriz de Kane 8×8 e a base de autoestados que diagonaliza a interação spin-órbita, dadas, respectivamente, na equação (2.98) e na tabela 2.6, àqueles resultados reportados na referência (38). Dentre os objetivos daquele artigo está o cálculo da estrutura eletrônica de semicondutores de rede wurtzita em *bulk* via o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, incluindo ainda os efeitos de *strain*. O paralelo entre a referência (38) e o nosso trabalho está no uso dos mesmos argumentos de teoria dos grupos para construir a matriz de Kane 8×8 a partir do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Entretanto, nossos resultados apresentam algumas diferenças que passaremos a discutir abaixo.

Na tabela 2.11 comparamos os elementos de matriz das interações cinética H_0 e spin-órbita H_{so} que formam o hamiltoniano de Kane dado na equação (2.8). Enquanto a segunda coluna desta tabela mostra os resultados reportados por Chuang & Chang, a terceira coluna exhibe aqueles elementos de matriz que apresentamos no decorrer deste capítulo. Vale ressaltar que ambos resultados levam em conta a prescrição das simetrias do grupo C_{6v} da rede wurtzita para determinar cada um destes acoplamentos. Embora os elementos de matriz de H_0 sejam diferentes em ambos os casos, as componentes S_x e S_z do operador momentum angular de spin têm elementos de matriz intrabanda de valência iguais. Note que o acoplamento via o termo cinético H_0 entre a banda de condução ($|z_c\rangle$) e o fundo da banda de valência ($|z\rangle$) é nulo na referência (38). Conforme argumentamos na seção 2.3, aqui escolhemos este termo sendo diferente de zero e igual a ϵ_3 . O mesmo acontece com o acoplamento mediado por spin entre os estados do topo ($|x\rangle$) e o fundo da banda de valência ($|z\rangle$) que é tomado nulo em (38) e aqui escolhemos tendo valor Δ_4 . Observe que os limites $\epsilon_1 \rightarrow E_c$, $\epsilon_2 \rightarrow E_v$, $\epsilon_3 \rightarrow 0$, $E_v \rightarrow E_v + \Delta_1$ e $\Delta_4 \rightarrow 0$ estabelecem a correspondência dos resultados de Chuang & Chang frente àqueles apresentados neste trabalho.

Conhecendo os elementos de matriz dados na tabela 2.11, a matriz de Kane 8×8 é obtida por Chuang & Chang através da projeção do hamiltoniano de Kane H dado em

Tabela 2.11 – Comparação dos elementos de matriz do hamiltoniano cinético H_0 e das componentes do operador momentum angular de spin $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ apresentados na referência (38) e aqueles fornecidos nas seções 2.3 e 2.4 desta dissertação. Note que os limites $\epsilon_1 \rightarrow E_c$, $\epsilon_2 \rightarrow E_v$, $\epsilon_3 \rightarrow 0$, $E_v \rightarrow E_v + \Delta_1$ e $\Delta_4 \rightarrow 0$ estabelecem a correspondência dos resultados naquela referência frente àqueles apresentados neste trabalho.

	Chuang & Chang	Bernardes & Pires
$\langle z_c H_0 z_c \rangle$	E_c	ϵ_1
$\langle z H_0 z \rangle$	E_v	ϵ_2
$\langle z_c H_0 z \rangle$	0	ϵ_3
$\langle x H_0 x \rangle$	$E_v + \Delta_1$	E_v
$\langle y H_0 y \rangle$	$E_v + \Delta_1$	E_v
$\langle x S_z y \rangle$	$-i\Delta_2$	$-i\Delta_2$
$\langle y S_x z \rangle$	$-i\Delta_3$	$-i\Delta_3$
$\langle z_c S_y x \rangle$	0	$-i\Delta_4$

(2.8) na base de estados formada pelos vetores indicados na tabela 2.12. Nesta tabela fornecemos também os autovalores das interações H_0 e H_{so} reportada por aqueles autores tendo em vista a mesma análise das simetrias que promovemos no decorrer deste capítulo. O leitor atento perceberá que esta formulação é um pouco diferente daquela que empregamos para construir a matriz de Kane 8×8 . Apenas para lembrar, em primeiro lugar projetamos o hamiltoniano H_0 na base de estados degenerada por spin dada em (2.25) e diagonalizamos a matriz resultante deste processo. O conjunto de autovetores vindos da solução do respectivo problema de autovalor foi escolhida como a nova base de autoestados utilizada para calcular os elementos de matriz de H_{so} . Em seguida, diagonalizamos exatamente a representação matricial de H_{so} , cujo conjunto de autovetores dados na tabela 2.5 formou a base de 8 estados definitiva do problema. Tomando a parametrização quase-cúbica definida na seção 2.4.1, o conjunto de autovetores $|v_l\rangle$ desta base se reduz àqueles apresentados na tabela 2.6.

Neste ponto, é instrutivo determinar a matriz de transformação entre os vetores $|c_l\rangle$ dados na tabela 2.12 e aqueles associados a diagonalização exata da interação spin-órbita que estudamos na seção 2.3. Em particular, tomaremos os vetores $|v_l\rangle$ vindos da parametrização quase-cúbica discutida na seção 2.4.1 e que podem ser encontrados na tabela 2.6. Tendo em vista as diferenças nos elementos de matriz mostrados na tabela 2.11, obviamente não é de se esperar que ao atuar esta transformação na matriz de Kane na equação 2.98 obteremos aquela reportada por Chuang & Chang ou vice-versa. Entretanto, esta transformação pode nos fornecer um meio ainda que qualitati-

Tabela 2.12 – Base de autoestados e soma dos autovalores das interações cinética H_0 e spin-órbita H_{so} utilizados por Chuang & Chang (38) na construção da matriz de Kane 8×8 do sistema hexagonal de rede wurtzita. Embora esta referência classifique a função base de simetria escalar que descreve a banda de condução pelo ket $|s\rangle$, manteremos a notação $|z_c\rangle$ utilizada nesta dissertação no intuito de facilitar nossas comparações.

l	$ c_l\rangle$	$\langle c_l H_0 + H_{so} c_l\rangle$
1	$i z_c\rangle \otimes +\rangle$	E_c
2	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(x\rangle + i y\rangle) \otimes +\rangle$	$E_v + \Delta_1 + \Delta_2$
3	$+\frac{1}{\sqrt{2}}(x\rangle - i y\rangle) \otimes +\rangle$	$E_v + \Delta_1 - \Delta_2$
4	$ z\rangle \otimes +\rangle$	E_v
5	$i z_c\rangle \otimes -\rangle$	E_c
6	$+\frac{1}{\sqrt{2}}(x\rangle - i y\rangle) \otimes -\rangle$	$E_v + \Delta_1 + \Delta_2$
7	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(x\rangle + i y\rangle) \otimes -\rangle$	$E_v + \Delta_1 - \Delta_2$
8	$ z\rangle \otimes -\rangle$	E_v

vo de comparar os resultados apresentados nesta dissertação àqueles trabalhos que se-
guem a mesma formulação destes autores. Assim, a matriz R que conecta o conjunto
de autofunções $\{|c_1\rangle, |c_2\rangle, |c_3\rangle, |c_4\rangle, |c_5\rangle, |c_6\rangle, |c_7\rangle, |c_8\rangle\}$ da referência (38) à base de esta-
dos $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle, |v_4\rangle, |v_5\rangle, |v_6\rangle, |v_7\rangle, |v_8\rangle\}$ na parametrização quase-cúbica (vide a seção
2.4.1) que diagonaliza a interação spin-órbita é

$$R = \begin{bmatrix} \cos \vartheta & 0 & 0 & -\sin \vartheta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cos \vartheta & 0 & 0 & -\sin \vartheta \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -i\frac{2}{\sqrt{6}}\sin \vartheta & 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}}\cos \vartheta & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & -i\frac{2}{\sqrt{6}}\sin \vartheta & 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}}\cos \vartheta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ i\frac{1}{\sqrt{3}}\sin \vartheta & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}\cos \vartheta & 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & -i\frac{1}{\sqrt{3}}\sin \vartheta & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}\cos \vartheta \end{bmatrix} \quad (2.109)$$

Em particular, se tomarmos o limite da parametrização cúbica onde $\vartheta = 0$, a matriz que
conecta as duas bases pode ser disposta numa forma bloco-diagonal,

$$\begin{bmatrix} \mathcal{V}_1 \\ \mathcal{V}_2 \\ \mathcal{V}_3 \\ \mathcal{V}_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} & & \\ 0_{2 \times 2} & \mathbb{1}_{2 \times 2} & & \\ & & \mathbb{W}_1 & 0_{2 \times 2} \\ 0_{2 \times 2} & & 0_{2 \times 2} & \mathbb{W}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{C}_1 \\ \mathcal{C}_2 \\ \mathcal{C}_3 \\ \mathcal{C}_4 \end{bmatrix}, \quad (2.110)$$

onde cada componente dos vetores coluna estão associados a uma das bases de autoesta-

dos, a saber,

$$\mathcal{V}_1 = \begin{bmatrix} |v_1\rangle \\ |v_2\rangle \end{bmatrix}, \quad \mathcal{V}_2 = \begin{bmatrix} |v_3\rangle \\ |v_6\rangle \end{bmatrix}, \quad \mathcal{V}_3 = \begin{bmatrix} |v_4\rangle \\ |v_7\rangle \end{bmatrix}, \quad \mathcal{V}_4 = \begin{bmatrix} |v_5\rangle \\ |v_8\rangle \end{bmatrix}, \quad (2.111)$$

$$\mathcal{C}_1 = \begin{bmatrix} |c_1\rangle \\ |c_5\rangle \end{bmatrix}, \quad \mathcal{C}_2 = \begin{bmatrix} |c_2\rangle \\ |c_6\rangle \end{bmatrix}, \quad \mathcal{C}_3 = \begin{bmatrix} |c_7\rangle \\ |c_4\rangle \end{bmatrix}, \quad \mathcal{C}_4 = \begin{bmatrix} |c_8\rangle \\ |c_3\rangle \end{bmatrix}. \quad (2.112)$$

e as matrizes bloco-diagonais $\mathbb{W}_n$, $n \in \{1, 2\}$, são escritas da seguinte maneira

$$\mathbb{W}_1 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} +\sqrt{2} & +2 \\ +2 & -\sqrt{2} \end{bmatrix}, \quad \mathbb{W}_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} +2 & +\sqrt{2} \\ +\sqrt{2} & -2 \end{bmatrix}. \quad (2.113)$$

Observe que na parametrização cúbica a transformação que conecta as duas bases também é caracterizada por uma matriz unitária.

Para concluir, em face das comparações que estabelecemos nesta seção e, principalmente, por tomar não-nulos os acoplamentos ϵ_3 e Δ_4 , acreditamos que nossos resultados sejam mais gerais que aqueles apresentados na referência (38), desconsiderando *strain*.

Capítulo 3

Equações efetivas

No capítulo anterior determinamos explicitamente a representação matricial do hamiltoniano de Kane na base de estados que diagonaliza o operador spin-órbita. Este resultado, conhecido como matriz de Kane (31), exibe um caráter mais geral frente aquele apresentado na literatura (32,38) uma vez que não descartamos os efeitos do termo ligado ao acoplamento entre a banda de condução e a banda de valência de *split-off* do campo cristalino.

Neste capítulo mostraremos como determinar a equação efetiva que descreve um elétron na banda de condução utilizando o chamado *folding down*, um método algébrico exato que consiste em desacoplar os espaços vetoriais associados aos espinores das bandas de condução e valência. Em seguida, executaremos um processo de linearização dos denominadores de energia envolvidos, cuja ordem de aproximação será dada em termos do inverso do gap de energia do material semiconductor.

3.1 O *folding down*

Conforme mostrado no capítulo anterior, a essência do modelo de Kane consiste em atribuir uma representação matricial para o hamiltoniano de Kane projetando-o na base

de estados que diagonaliza o operador spin-órbita. Sendo a base formada por um conjunto de 8 vetores de estado, a projeção fornece o chamado hamiltoniano de Kane 8×8 (31–33), o qual pode ser propositalmente escrito em termos de blocos matriciais,

$$H = \begin{bmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_v \end{bmatrix}. \quad (3.1)$$

O bloco H_c , o mais simples comparado aos demais, representa a banda de condução e é proporcional a matriz identidade de ordem 2×2 ,

$$H_c = E_0 \mathbb{1}_{2 \times 2}. \quad (3.2)$$

Analogamente, o bloco H_{cv} é representado por uma matriz que descreve o acoplamento entre as bandas de condução e valência. No apêndice B mostramos que esta matriz pode ser reescrita na forma

$$H_{cv} = \begin{bmatrix} \mathbb{M}_1 & \mathbb{M}_2 & \mathbb{M}_3 \end{bmatrix}, \quad (3.3)$$

onde os termos $\mathbb{M}_l$ são dados por

$$\mathbb{M}_1 = +\frac{2\bar{P}_1}{\sqrt{6}}\mathbf{M} \cdot \mathbf{k}_\parallel + \frac{2P_2}{\sqrt{6}}M_z k_z, \quad \mathbb{M}_2 = +\frac{2\bar{P}_1}{\sqrt{6}}\mathbf{N} \cdot \mathbf{k}_\parallel + \frac{2P_2}{\sqrt{6}}N_z k_z, \quad \mathbb{M}_3 = -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}_\parallel - \frac{P_2}{\sqrt{3}}\sigma_z k_z. \quad (3.4)$$

Apenas para deixar claro, $\boldsymbol{\sigma}$ representa um vetor cujas componentes são dadas em função das matrizes de Pauli, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. O mesmo raciocínio se aplica para os vetores $\mathbf{M}$ e $\mathbf{N}$, ou seja, $\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$ e $\mathbf{N} = (N_x, N_y, N_z)$, onde

$$M_x = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_y = -\frac{i}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_z = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.5)$$

e

$$N_x = +\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}, \quad N_y = -\frac{i}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}, \quad N_z = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

No apêndice B mostramos também que o bloco H_v de ordem 6×6 correspondente a banda de valência pode ser decomposto em termos de duas contribuições distintas,

$$H_v = H_{vD} + H_{vT}, \quad (3.7)$$

onde H_{vD} representa uma matriz puramente diagonal,

$$H_{vD} = \begin{bmatrix} E_1 \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & E_2 \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix}, \quad (3.8)$$

e H_{vT} é uma matriz hermitiana de traço identicamente nulo,

$$H_{vT} = \frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{3}} \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix} (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \\ + \frac{\sqrt{2}}{3} \tilde{P}_1 \begin{bmatrix} 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & i\sqrt{2} N_z k_- & iM_x k_- \\ -i\sqrt{2} M_z k_+ & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & -iN_x k_+ \\ -iM_x k_+ & iN_x k_- & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix}. \quad (3.9)$$

O bloco H_{vT} apresenta alguns aspectos interessantes, dentre eles a presença do termo de interação spin-órbita *a la* Rashba $k_y \sigma_x - k_x \sigma_y$ e a independência na componente k_z do vetor de onda. De acordo com a seção 2.4, estas características se devem exclusivamente ao fato de que formulamos o modelo de Kane considerando não-nulo o termo que descreve o acoplamento entre a banda de condução e a banda de valência de *split-off* do campo cristalino, ou seja, admitindo $\Delta_4 \neq 0$. Por outro lado, o bloco H_{vT} se anula completamente no contexto da parametrização cúbica, ou seja, $\tilde{P}_1 = 0$ para $\vartheta = 0$. Esta escolha possui implicações diretas na matriz H_v , que passa a exibir o caráter estritamente diagonal reportado na maioria das referências (38, 42, 44).

A idéia do *folding down* consiste em transformar o hamiltoniano de Kane 8×8 em um hamiltoniano de ordem 2×2 que descreva apenas a banda de condução. Vale ressaltar que este é um procedimento algébrico exato, livre de qualquer tipo de aproximação. Neste sentido, não foi em vão o motivo pelo qual escolhemos representar o hamiltoniano de Kane na forma de blocos matriciais. Na verdade, propondo um espinor Ψ autoestado de H que possua a mesma dependência em blocos, vamos ser capazes de escrever uma equação efetiva para a banda de condução desacoplada da banda de valência, muito embora ainda contenha influências dela via a conservação de probabilidade do espinor Ψ .

Seja então um espinor Ψ de componentes ψ_0 e ψ_v , autoestado do hamiltoniano de Kane H . A componente espinorial ψ_0 representa um estado associado a banda de condução, enquanto ψ_v caracteriza um espinor de componentes ψ_μ , onde $\mu \in \{1, 2, 3\}$, ligado diretamente aos estados que descrevem a banda de valência. Partindo da equação de autovalor associada ao problema, $H\Psi = E\Psi$, encontramos um sistema de equações que acopla os estados ψ_0 e ψ_v , a saber,

$$H_c\psi_0 + H_{cv}\psi_v = E\psi_0, \quad (3.10)$$

$$H_{cv}^\dagger\psi_0 + H_v\psi_v = E\psi_v. \quad (3.11)$$

Como estamos interessados em encontrar uma equação efetiva para a banda de condução, devemos resolver o sistema de equações acima em termos da componente espinorial ψ_0 . Para tanto, simplificando a equação (3.11) temos

$$\psi_v = (E\mathbf{1}_{6\times 6} - H_v)^{-1}H_{cv}^\dagger\psi_0. \quad (3.12)$$

Substituindo este resultado na equação (3.10), encontramos a seguinte equação para a banda de condução

$$H_c\psi_0 + H_{cv}(E\mathbf{1}_{6\times 6} - H_v)^{-1}H_{cv}^\dagger\psi_0 = E\mathbf{1}_{2\times 2}\psi_0. \quad (3.13)$$

Em linhas gerais, este resultado descreve o movimento de uma partícula na banda de condução associada a componente espinorial ψ_0 sob ação de um potencial efetivo V_{ef} devido ao acoplamento com a banda de valência representada por ψ_v , onde

$$V_{ef} = H_{cv}(E\mathbf{1}_{6\times 6} - H_v)^{-1}H_{cv}^\dagger. \quad (3.14)$$

Muito embora (3.13) possua uma estrutura análoga a equação de Schrödinger independente do tempo, existe uma inconsistência muito sutil nesta comparação. Ao contrário da equação de Schrödinger que representa essencialmente um problema de autovalor, existe aqui um caráter não-linear nas energias uma vez que o próprio hamiltoniano efetivo depende do autovalor E .

Mas como contornar este problema? Numa primeira análise, a não-linearidade no autovalor de energia exclui qualquer esperança de encontrar resultados exatamente solúveis.

Ainda mais, grande parte da nossa dificuldade algébrica está na inversa $(E\mathbf{1}_{6\times 6} - H_v)^{-1}$. Como H_v não é diagonal devido a presença do bloco H_{vT} , calcular a matriz inversa na equação (3.13) para a banda de condução representa um processo nada trivial, mesmo utilizando ferramentas computacionais algébricas. Entretanto, tentando contornar este problema provisoriamente,

$$E\mathbf{1}_{6\times 6} - H_v = E\mathbf{1}_{6\times 6} - H_{vD} - H_{vT} = \tilde{H}_{vD} - H_{vT} , \quad (3.15)$$

onde definidos uma nova matriz diagonal,

$$\tilde{H}_{vD} = \begin{bmatrix} (E - E_1) \mathbf{1}_{2\times 2} & 0 & 0 \\ 0 & (E - E_2) \mathbf{1}_{2\times 2} & 0 \\ 0 & 0 & (E - E_3) \mathbf{1}_{2\times 2} \end{bmatrix} . \quad (3.16)$$

Reescrevendo a inversa em termos da equação (3.15), podemos fazer algumas simplificações importantes,

$$(E\mathbf{1}_{6\times 6} - H_v)^{-1} = (\tilde{H}_{vD} - H_{vT})^{-1} = (\mathbf{1}_{6\times 6} - \tilde{H}_{vD}^{-1}H_{vT})^{-1} \tilde{H}_{vD}^{-1} . \quad (3.17)$$

Vale ressaltar que a matriz $\tilde{H}_{vD}^{-1}$ é inversamente proporcional a diferença de energias $E - E_l$, em geral muito maior que qualquer contribuição vinda do bloco H_{vT} . Assim, podemos expandir o último termo a direita da equação (3.17) numa série de potências infinita que converge rapidamente, tendo a diferença de energias $E - E_l$ como parâmetro de ordem (44),

$$(E\mathbf{1}_{6\times 6} - H_v)^{-1} \approx \tilde{H}_{vD}^{-1} + \tilde{H}_{vD}^{-1}H_{vT}\tilde{H}_{vD}^{-1} + \dots \quad (3.18)$$

Deste resultado, nada mais razoável então que truncar a aproximação nos primeiros elementos da série, em particular naqueles termos com dependência quadrática no inverso do gap de energia. Chamo a atenção do leitor para a ligeira semelhança existente entre este procedimento e aquele utilizado no cálculo de operadores resolventes em teoria de perturbação (13, 16), o que nos permite atribuir inocentemente à equação (3.18) o título de resolvente do problema. Substituindo este resultado na equação (3.13), encontramos

finalmente uma equação efetiva para a banda de condução, a saber,

$$E\psi_0 = \left\{ E_0 \mathbb{1}_{2 \times 2} + H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{cv}^\dagger \right\} \psi_0 + H_{cv} \left\{ \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{vT} \tilde{H}_{vD}^{-1} \right\} H_{cv}^\dagger \psi_0 + \dots \quad (3.19)$$

A equação (3.19) representa um dos pilares centrais deste trabalho. A partir dela, temos um modelo efetivo para o hamiltoniano que descreve um elétron na banda de condução tanto de semicondutores na fase *bulk* quanto em poços quânticos formados pela junção de heteroestruturas semicondutoras. Enquanto no caso *bulk* as energias E_l são dadas em (2.61), para a heteroestrutura estas energias são redefinidas na equação (2.107) através do formalismo das funções envelope.

O cuidado que teremos a partir de agora está nos denominadores de energia que aparecem em cada termo na equação (3.19). Na prática, vamos introduzir uma linearização nos denominadores de energia desta equação partindo da hipótese que o gap E_g é maior que qualquer outra diferença de energia do sistema. De maneira geral, dado um número natural n ,

$$(E - E_l)^{-n} = \frac{1}{E_{gl}^n} \left\{ 1 + \frac{E - [\varepsilon_k + V_l(z)]}{E_{gl}} \right\}^{-n} \approx \frac{1}{E_{gl}^n} - n \frac{E - [\varepsilon_k + V_l(z)]}{E_{gl}^{n+1}} + \dots \quad (3.20)$$

Considerando este regime de aproximação como ponto de partida, o termo proporcional a inversa $\tilde{H}_{vD}^{-1}$ na equação (3.19) possui dependência inversamente proporcional ao gap de energia, ou seja,

$$H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{cv}^\dagger \propto (E - E_l)^{-1} \approx \frac{1}{E_{gl}}. \quad (3.21)$$

Levando a cabo apenas a aproximação em primeira ordem, adianto ao leitor que este termo será responsável pela equação efetiva associada ao confinamento eletrônico em heteroestruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade no qual estamos interessados. Diferentemente do resultado encontrado em sistemas cúbicos (42, 43), esta equação já apresenta uma interação dependente de spin de razoável intensidade. Analogamente, o termo proporcional a inversa $\tilde{H}_{vD}^{-2}$ na equação (3.19) possui dependência inversamente proporcional ao quadrado do gap de energia,

$$\tilde{H}_{vD}^{-1} H_{vT} \tilde{H}_{vD}^{-1} \propto (E - E_l)^{-2} \approx \frac{1}{E_{gl}^2}. \quad (3.22)$$

Aliado à contribuição em primeira ordem discutida ainda a pouco e tomando o potencial $V_0(z) = 0$ que recobra o hamiltoniano de Kane para o semiconductor na fase *bulk*, este termo acrescentará uma correção inédita em segunda ordem para o hamiltoniano efetivo que descreve a monoestrutura semicondutora conforme veremos na seção 3.2.2.

3.2 O hamiltoniano efetivo em primeira ordem

3.2.1 Heteroestrutura

Para determinar o hamiltoniano efetivo em primeira ordem de aproximação no inverso do gap de energia vamos partir da equação (3.19) e manter apenas o primeiro termo entre chaves à direita. Como vimos na seção anterior, a primeira correção não-nula vinda do segundo termo será proporcional ao inverso do quadrado das energias e não nos interessa neste momento. Em outras palavras, a equação para o elétron na banda de condução será determinada pela expressão

$$\left(E_0 \mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{cv}^\dagger \right) \psi_0 = E \psi_0 . \quad (3.23)$$

Conforme mostramos na equação (2.107), a energia E_0 é dada pela soma do potencial $V_0(z)$ que descreve a interação que o elétron está sujeito e uma contribuição puramente cinética vinda da projeção do hamiltoniano de Pauli na base de estados de Bloch, ou seja,

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} k_z^2 + V_0(z) . \quad (3.24)$$

A necessidade da separação entre as componentes paralela e perpendicular do vetor de onda no termo cinético ficará um pouco mais clara no decorrer desta seção. Segundo a seção 2.6 este potencial, por sua vez, se decompõe na soma da interação auto-consistente de Hartree $V_H(z)$ e o potencial estrutural $\nu_0(z)$ associado ao poço quântico que confina

o movimento do elétron,

$$V_0(z) = V_H(z) + \nu_0(z) . \quad (3.25)$$

Estas características ilustram que numa heteroestrutura os potenciais são claramente dependentes da posição, em particular aqui através da coordenada z que representa a direção de crescimento do poço quântico, além da componente k_z do vetor de onda representar um operador via a aproximação das funções envelope (43, 56).

Se não recorrermos a nenhuma aproximação, o termo remanescente que devemos calcular explicitamente na equação (3.23) é

$$H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{cv}^\dagger \psi_0 = \sum_{i=1}^3 \mathbb{M}_i (E - E_i)^{-1} \mathbb{M}_i^\dagger \psi_0 , \quad (3.26)$$

onde as matrizes $\mathbb{M}_l$ são indicadas na equação (3.4) e o leitor pode consultar mais detalhes acerca desta decomposição no apêndice B. Como já discutido na seção anterior, a diferença $E - E_i$ é em geral muito menor que a energia do gap do material semiconductor. A partir deste fato podemos desenvolver uma série de linearizações nos denominadores de energia tendo $1/E_{gi}$ como parâmetro de ordem, processo similar a expansão da equação de Dirac em ordens de $1/c$ via a transformação de Foldy-Wouthuysen (13). Truncando a expansão no termo proporcional a primeira ordem no inverso do gap de energia e desenvolvendo a soma indicada, a equação (3.26) apresenta a forma

$$H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{cv}^\dagger \psi_0 \simeq \frac{1}{E_{g1}} \mathbb{M}_1 \mathbb{M}_1^\dagger \psi_0 + \frac{1}{E_{g2}} \mathbb{M}_2 \mathbb{M}_2^\dagger \psi_0 + \frac{1}{E_{g3}} \mathbb{M}_3 \mathbb{M}_3^\dagger \psi_0 . \quad (3.27)$$

O problema agora se reduz a ação do produto de matrizes $\mathbb{M}_l \mathbb{M}_l^\dagger$ no espinor da banda de condução ψ_0 . Na prática, desenvolver estes produtos constitui uma tarefa bem simples uma vez que cada matriz possui dimensão 2×2 . Curiosamente, pode ser facilmente mostrado que um destes produtos se transforma numa combinação linear dos demais,

$$2\mathbb{M}_3 \mathbb{M}_3^\dagger = \mathbb{M}_1 \mathbb{M}_1^\dagger + \mathbb{M}_2 \mathbb{M}_2^\dagger . \quad (3.28)$$

Este vínculo será muito útil não apenas no decorrer desta seção, mas também em todo o tratamento que daremos para as transições ópticas no capítulo 6. O leitor pode novamente consultar esta demonstração no apêndice B, bem como verificar os detalhes do cálculo de

cada produto $\mathbb{M}_l \mathbb{M}_l^\dagger$. Substituindo o vínculo (3.28) na equação (3.27),

$$H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{cv}^\dagger \psi_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{E_{g1}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \mathbb{M}_1 \mathbb{M}_1^\dagger \psi_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{2}{E_{g2}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \mathbb{M}_2 \mathbb{M}_2^\dagger \psi_0 . \quad (3.29)$$

Os coeficientes dependentes no inverso de energias que precedem os produtos matriciais $\mathbb{M}_l \mathbb{M}_l^\dagger$ nesta equação representam o primeiro indício da presença de massas efetivas no hamiltoniano efetivo que obteremos ao final. Desenvolvendo os produtos indicados vamos tentar reescrever esta equação de forma mais simples,

$$\begin{aligned} H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{cv}^\dagger \psi_0 = & \frac{1}{2} \left(\frac{2}{E_{g1}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \left\{ \frac{\bar{P}_1^2}{6} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} k_{||}^2 + \frac{2P_2^2}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} k_z^2 + \right. \\ & \left. - \frac{1}{3} \bar{P}_1 P_2 \begin{bmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{bmatrix} k_z \right\} \psi_0 + \frac{1}{2} \left(\frac{2}{E_{g2}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \left\{ \frac{\bar{P}_1^2}{6} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} k_{||}^2 + \frac{2P_2^2}{3} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} k_z^2 + \right. \\ & \left. + \frac{1}{3} \bar{P}_1 P_2 \begin{bmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{bmatrix} k_z \right\} \psi_0 . \quad (3.30) \end{aligned}$$

A maneira como dispomos esta equação reflete a ordem dos produtos matriciais na equação (3.29) e torna nítidas duas dependências distintas nas componentes do módulo quadrado do vetor de onda. A componente paralela ao plano xy está sempre acompanhada do parâmetro de Kane P_1 , resultado esperado inclusive nos cálculos em primeira ordem para sistemas cúbicos (42, 43). Diferentemente, a componente paralela ao eixo de crescimento z do poço quântico aparece multiplicada pelo parâmetro de Kane P_2 , resultado não observado em sistemas cúbicos que pode ser entendido através da quebra de simetria introduzida pelo sistema hexagonal. Isto justifica o motivo de separarmos o vetor de onda em termos das componentes perpendicular e paralela na expressão da energia E_0 dada em (3.24). Uma característica comum a ambos os termos está na presença da matriz que acompanha a componente linear em k_z do vetor de onda. Com algumas simples manipulações algébricas, somos capazes de reescrevê-la em função de uma combinação linear das matrizes σ_x , σ_y e das componentes do vetor de onda no plano $\mathbf{k}_{||} = (k_x, k_y)$,

$$\begin{bmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{bmatrix} = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y = \Sigma , \quad (3.31)$$

onde Σ representa o operador helicidade no plano. Adianto ao leitor que este termo é inteiramente responsável pela interação dependente de spin presente no hamiltoniano que encontraremos em primeira ordem, resultado diferente daquele observado em sistemas cúbicos, particularmente redes zinblende, onde emergem as interações spin-órbita de Dresselhaus (21) e Rashba (22), e somente em segunda ordem. Como o termo de Rashba encontrado na equação (3.9) é dependente em segunda ordem, não será considerado aqui. Utilizando a definição adotada para o operador helicidade e ordenando a equação (3.30) de modo a deixar em evidência as componentes do vetor de onda, temos

$$\begin{aligned}
H_{cv}\tilde{H}_v^{-1}H_{cv}^\dagger\psi_0 = & \\
= \frac{\bar{P}_1^2}{6} \left\{ \left(\frac{3}{E_{g1}} + \frac{1}{E_{g2}} + \frac{2}{E_{g3}} \right) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \left(\frac{1}{E_{g1}} + \frac{3}{E_{g2}} + \frac{2}{E_{g3}} \right) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right\} k_{||}^2\psi_0 + \\
& + \frac{P_2^2}{3} \left\{ \left(\frac{2}{E_{g1}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \left(\frac{2}{E_{g2}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right\} k_z^2\psi_0 + \\
& - \frac{\bar{P}_1 P_2}{3} \left(\frac{1}{E_{g1}} - \frac{1}{E_{g2}} \right) \Sigma k_z \psi_0 . \quad (3.32)
\end{aligned}$$

Existem duas maneiras de reescrever o resultado exposto nesta equação. A primeira delas, mais imediata e intuitiva, consiste em somar as matrizes da forma como estão apresentadas e definir os coeficientes que as multiplicam como massas efetivas. Na verdade, como veremos ao final do capítulo, definir as massas efetivas neste momento apenas trará complicações desnecessárias e agregará mais parâmetros ao modelo quando projetarmos o hamiltoniano efetivo na base que diagonaliza o operador helicidade no plano. Assim, a forma mais conveniente de simplificar esta equação consiste em decompor cada matriz em termos de outras previamente conhecidas, particularmente através da soma e diferença entre a identidade $\mathbf{1}_{2\times 2}$ e σ_z , a saber,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} (\mathbf{1}_{2\times 2} + \sigma_z) , \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} (\mathbf{1}_{2\times 2} - \sigma_z) . \quad (3.33)$$

Substituindo este resultado na equação (3.32), temos agora um método definitivo para

escrever o produto $H_{cv}\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{cv}^\dagger$, dado por

$$\begin{aligned} H_{cv}\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{cv}^\dagger\psi_0 &= \frac{\bar{P}_1^2}{3} \left\{ \left(\frac{1}{E_{g1}} + \frac{1}{E_{g2}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \mathbb{1}_{2\times 2} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{E_{g1}} - \frac{1}{E_{g2}} \right) \sigma_z \right\} k_{||}^2 \psi_0 + \\ &+ \frac{P_2^2}{3} \left\{ \left(\frac{1}{E_{g1}} + \frac{1}{E_{g2}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \mathbb{1}_{2\times 2} + \left(\frac{1}{E_{g1}} - \frac{1}{E_{g2}} \right) \sigma_z \right\} k_z^2 \psi_0 - \frac{\bar{P}_1 P_2}{3} \left(\frac{1}{E_{g1}} - \frac{1}{E_{g2}} \right) \Sigma k_z \psi_0 . \end{aligned} \quad (3.34)$$

Chamo a atenção do leitor para a importância e robustez deste resultado algébrico. De fato, se considerarmos a parametrização cúbica onde $\vartheta = 0$, a correspondência $\bar{P}_1 \rightarrow P_1$ no parâmetro de Kane será a única mudança imposta a esta expressão. Ainda mais, como E_0 não depende de nenhum parâmetro de Kane, esta condição se estenderá portanto ao hamiltoniano efetivo em primeira ordem para a heteroestrutura semicondutora.

Substituindo (3.34) no lado esquerdo da equação (3.23), temos

$$\begin{aligned} (E_0 \mathbb{1}_{2\times 2} + H_{cv}\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{cv}^\dagger) \psi_0 &= \left\{ \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_0} + \frac{2\bar{P}_1^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_{g1}} + \frac{1}{E_{g2}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \right] k_{||}^2 + \right. \\ &+ \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_0} + \frac{2P_2^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_{g1}} + \frac{1}{E_{g2}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \right] k_z^2 + V_0(z) \left. \right\} \mathbb{1}_{2\times 2} \psi_0 + \left\{ \frac{\hbar^2}{2} \frac{\bar{P}_1^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_{g1}} - \frac{1}{E_{g2}} \right) k_{||}^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar^2}{2} \frac{2P_2^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_{g1}} - \frac{1}{E_{g2}} \right) k_z^2 \right\} \sigma_z \psi_0 - \frac{\bar{P}_1 P_2}{3} \left(\frac{1}{E_{g1}} - \frac{1}{E_{g2}} \right) \Sigma k_z \psi_0 . \end{aligned} \quad (3.35)$$

Dados os coeficientes que multiplicam cada componente do vetor de onda nesta equação, estamos prontos para definir as massas efetivas que caracterizam nosso modelo. Cada termo desse possui uma dependência específica nas energias observadas na estrutura de bandas do material semicondutor, ou seja, enquanto alguns dependem apenas do gap de energia E_g e do *split-off* do campo cristalino Δ_c , nos demais há ainda a dependência com o acoplamento spin-órbita Δ_{so} . Neste sentido, considerando inicialmente os termos que acompanham a matriz identidade, vamos definir as massas efetivas paralela $m_{||}$ e perpendicular $m_{\perp}$,

$$\frac{1}{m_{||}} = \frac{1}{m_0} + \frac{2\bar{P}_1^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_c} + \frac{1}{E_g + \Delta_c + \Delta_{so}} \right) , \quad (3.36)$$

$$\frac{1}{m_{\perp}} = \frac{1}{m_0} + \frac{2P_2^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_c} + \frac{1}{E_g + \Delta_c + \Delta_{so}} \right) . \quad (3.37)$$

Uma vez que $\bar{P}_1 = P_1 = P_2$ e $\Delta_c = 0$ no limite de sistemas cúbicos, segue que $m_{||} = m_{\perp}$

para estas estruturas. Analogamente a estas quantidades, levando em conta os termos que acompanham a matriz σ_z , podemos definir novas massas efetivas dependentes de spin com contribuição paralela $M_{\parallel}$ e perpendicular $M_{\perp}$,

$$\frac{1}{M_{\parallel}} = \frac{\overline{P}_1^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E_g + \Delta_c} \right), \quad \frac{1}{M_{\perp}} = \frac{2P_2^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E_g + \Delta_c} \right). \quad (3.38)$$

Por último, nada mais sugestivo definir também uma massa efetiva agregada ao operador helicidade no plano,

$$\gamma_{1,12} = \frac{\overline{P}_1 P_2}{3} \left(\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E_g + \Delta_c} \right). \quad (3.39)$$

Similarmente ao caso das massas associadas a matriz σ_z , a quantidade $\gamma_{1,12}$ depende apenas do gap de energia e do *split-off* do campo cristalino, sendo insensível a qualquer modificação no acoplamento spin-órbita.

Substituindo (3.36)–(3.39) na equação (3.35), uma vez que estamos no regime de validade da aproximação de primeira ordem estabelecida na equação (3.23) onde

$$H\psi_0 = \left(E_0 \mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{cv}^{\dagger} \right) \psi_0 = E\psi_0, \quad (3.40)$$

finalmente encontramos o hamiltoniano efetivo que descreve um elétron na banda de condução de um material semiconductor de estrutura hexagonal, particularmente rede wurtzita, em primeira ordem, a saber,

$$H = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} k_z^2 + V_0(z) \right\} \mathbf{1}_{2 \times 2} + \left\{ \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} k_z^2 \right\} \sigma_z - \gamma_{1,12} \Sigma k_z. \quad (3.41)$$

Vale ressaltar novamente a presença das interações dependentes de spin já no regime da aproximação em primeira ordem. Em sistemas cúbicos a interação dependente em spin surge apenas se considerarmos as correções vindas em segunda ordem no gap de energia (22, 42, 44). Ainda na correspondência com o caso cúbico, dada a inexistência da quebra de degenerescência introduzida por Δ_c em semicondutores de rede zinblende, a equação em primeira ordem não depende em spin para estes sistemas uma vez que $\gamma_{1,12} = M_{\parallel} = M_{\perp} = 0$. No que se refere a heteroestrutura, limitaremos este estudo às correções em primeira ordem e deixaremos aquelas associadas a segunda ordem para trabalhos posteriores.

3.2.2 Monoestrutura

Vamos dedicar esta seção ao cálculo da equação efetiva que descreve o elétron na banda de condução de semicondutores na fase *bulk*, ou seja, materiais com alto grau de pureza e livres de qualquer tipo de defeito estrutural na rede cristalina. Na prática sabemos que esta situação realmente representa uma idealização, mas a indústria de semicondutores investe cifras gigantescas no que se refere a formação de recursos humanos e desenvolvimento de novas tecnologias em busca de materiais cada vez mais puros.

Conforme mencionamos no capítulo 2, além de promover as componentes do vetor de onda ao nível de operadores, a aproximação das funções envelope usada para descrever a heteroestrutura apenas acrescenta o potencial $V_l(z)$, $l \in (0, 1, 2, 3)$, nas energias do hamiltoniano de Kane associado a monoestrutura semicondutora. Neste sentido, podemos tratar este caso como uma particularização do resultado que determinamos na seção anterior bastando considerar o potencial $V_0(z)$ identicamente nulo e k_z como um número.

A idéia agora consiste em truncar a expansão no inverso do gap de energia na primeira contribuição não-nula vinda de cada termo na equação (3.19). Efetivamente, esta tarefa consiste nada mais que o acréscimo de uma correção proporcional a segunda ordem no inverso do gap de energia ao resultado que encontramos para a heteroestrutura. Assim,

$$H\psi_0 = \left(E_0 \mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{cv}^\dagger\right) \psi_0 + H_{cv} \left(\tilde{H}_{vD}^{-1} H_{vT} \tilde{H}_{vD}^{-1}\right) H_{cv}^\dagger \psi_0 + \dots = E\psi_0 . \quad (3.42)$$

Note que já conhecemos o resultado fornecido pelo primeiro termo entre parênteses à direita da equação (3.42). Antes de prosseguir, porém, optaremos por redefinir as massas efetivas vindas da equação (3.41) de uma maneira alternativa, a saber,

$$\mathfrak{a}_1 = \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} , \quad \mathfrak{a}_2 = \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} , \quad \mathfrak{a}_3 = \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} , \quad \mathfrak{a}_4 = \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} , \quad \mathfrak{a}_5 = \gamma_{1,12} . \quad (3.43)$$

Esta forma de escrever as massas efetivas será uma característica particular da monoestrutura neste trabalho e facilitará muito o tratamento algébrico da relação de dispersão e dos autoestados que daremos no capítulo 4. Reescrevendo a equação (3.41) via esta nova

notação para o caso em que o potencial de interação é nulo, temos

$$\left(E_0 \mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{cv}^\dagger\right) \psi_0 = \left(\mathbf{a}_1 k_{||}^2 + \mathbf{a}_2 k_z^2\right) \mathbf{1}_{2 \times 2} \psi_0 + \left(\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2\right) \sigma_z \psi_0 - \mathbf{a}_5 k_z \Sigma \psi_0 . \quad (3.44)$$

A essência em descartar o potencial V_0 está na retomada da simetria de translação intrínseca ao semiconductor na fase *bulk*. Seria incorreto então pensar que o elétron na banda de condução não está sujeito a qualquer tipo de interação. De fato, os efeitos da interação devida ao potencial periódico da rede cristalina já estão incluídos nas massas efetivas através dos parâmetros de Kane e gaps de energia. Além disso, deve-se ter em mente que as componentes do vetor de onda na monoestrutura representam números, ou seja, o espinor da banda de condução ψ_0 estará sujeito apenas a ação do operador helicidade e das matrizes $\mathbf{1}_{2 \times 2}$, σ_x e σ_z .

Vamos agora calcular o segundo termo da série infinita dada na equação (3.42). O leitor deve recordar que separamos o bloco H_v articulado à banda de valência no hamiltoniano de Kane em duas parcelas ligeiramente distintas, a saber, H_{vD} e H_{vT} . Enquanto H_{vD} representa uma matriz diagonal, H_{vT} define uma matriz com traço identicamente nulo. As equações para estas matrizes podem ser encontradas respectivamente em (3.8) e (3.9), enquanto os cálculos que mostram esta decomposição singular podem ser consultados no apêndice B. Por sua vez, durante o *folding down* toda a dependência diagonal de H_v recai na nova matriz $\tilde{H}_{vD}$ devido a presença do autovalor E nos elementos diagonais de H_{vD} . Assim, a correção mais baixa no processo de linearização dos denominadores de energia na matriz $\tilde{H}_{vD}^{-1}$ é proporcional ao inverso do gap de energia,

$$\tilde{H}_{vD}^{-1} \approx \begin{bmatrix} E_{g1}^{-1} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & E_{g2}^{-1} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & 0 & E_{g3}^{-1} \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix} . \quad (3.45)$$

A partir deste resultado e conhecendo o perfil da matriz H_{vT} dado em (3.9) é relativamente

simples chegar a seguinte expressão

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{vT} \tilde{H}_{vD}^{-1} = \frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}} & \begin{bmatrix} E_{g1}^{-2} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & E_{g2}^{-2} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{3}} E_{g3}^{-2} \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix} (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \\ & + \frac{\sqrt{2}}{3} \tilde{P}_1 \begin{bmatrix} 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & \frac{i\sqrt{2}}{E_{g1} E_{g2}} N_z k_- & \frac{i}{E_{g1} E_{g3}} M_x k_- \\ \frac{i\sqrt{2}}{E_{g1} E_{g2}} M_z k_+ & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & \frac{-i}{E_{g2} E_{g3}} N_x k_- \\ \frac{-i}{E_{g1} E_{g3}} M_x k_+ & \frac{i}{E_{g2} E_{g3}} N_x k_- & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix}. \quad (3.46) \end{aligned}$$

Em consequência da equação (3.44), esta expressão apresenta apenas dependência em segunda ordem no inverso do gap de energia, mesmo para o bloco inversamente proporcional a produtos mistos $E_{gi} E_{gj}$. O próximo passo consiste multiplicar ambos os lados desta equação pela matriz H_{cv} dada em (3.3) e seu hermitiano complexo. Uma vez que H_{cv} consiste de uma matriz linha cujos elementos são os blocos $\mathbb{M}_l$, efetuar este produto também é uma tarefa bem simples,

$$\begin{aligned} H_{cv} \left(\tilde{H}_{vD}^{-1} H_{vT} \tilde{H}_{vD}^{-1} \right) H_{cv}^\dagger \psi_0 = \frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}} & \left\{ \frac{1}{E_{g1}^2} \mathbb{M}_1 (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \mathbb{M}_1^\dagger + \frac{1}{E_{g2}^2} \mathbb{M}_2 (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \mathbb{M}_2^\dagger + \right. \\ & + \left. \frac{1}{E_{g3}^2} \mathbb{M}_3 (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \mathbb{M}_3^\dagger \right\} \psi_0 + \frac{\sqrt{2}}{3} \tilde{P}_1 \left\{ \frac{i\sqrt{2}}{E_{g1} E_{g2}} \left(\mathbb{M}_1 N_z \mathbb{M}_2^\dagger k_- - \mathbb{M}_2 M_z \mathbb{M}_1^\dagger k_+ \right) + \right. \\ & + \left. \frac{i}{E_{g1} E_{g3}} \left(\mathbb{M}_1 M_x \mathbb{M}_3^\dagger k_- - \mathbb{M}_3 M_x \mathbb{M}_1^\dagger k_+ \right) + \frac{i}{E_{g2} E_{g3}} \left(\mathbb{M}_3 N_x \mathbb{M}_2^\dagger k_- - \mathbb{M}_2 N_x \mathbb{M}_3^\dagger k_+ \right) \right\} \psi_0. \quad (3.47) \end{aligned}$$

Além dos termos proporcionais ao tradicional acoplamento de Rashba, a equação anterior depende também da diferença de produtos hermitianos como aqueles representados no segundo termo entre chaves. No intuito de poupar cálculos desnecessários que podem sobrecarregar o texto, apresentamos no apêndice B os detalhes de cada produto indicado na equação (3.47). Assim, substituindo aqui apenas os resultados finais e recorrendo a simplificações algébricas simples, esta equação pode ser convertida na forma

$$H_{cv} \left(\tilde{H}_{vD}^{-1} H_{vT} \tilde{H}_{vD}^{-1} \right) H_{cv}^\dagger \psi_0 = \left(\mathbf{a}_6 k_{||}^2 + \mathbf{a}_7 k_z^2 \right) (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \psi_0, \quad (3.48)$$

onde os parâmetros $\mathbf{a}_6$ e $\mathbf{a}_7$ definem novas massas efetivas para o modelo,

$$\mathbf{a}_6 = \frac{1}{9} \left[\frac{1}{E_{g1}} \left(\frac{4}{E_{g2}} - \frac{1}{E_{g3}} \right) - \frac{1}{E_{g3}} \left(\frac{1}{E_{g2}} + \frac{2}{E_{g3}} \right) + \frac{3}{2} \left(\frac{1}{E_{g1}} - \frac{1}{E_{g2}} \right)^2 \right] \tilde{P}_1 \bar{P}_1^2, \quad (3.49)$$

$$\mathbf{a}_7 = \frac{1}{9} \left[\frac{1}{E_{g1}} \left(\frac{4}{E_{g2}} - \frac{1}{E_{g3}} \right) - \frac{1}{E_{g3}} \left(\frac{1}{E_{g2}} + \frac{2}{E_{g3}} \right) \right] \tilde{P}_1 P_2^2. \quad (3.50)$$

É conveniente relembrar que estas massas são identicamente nulas no contexto da parametrização cúbica, ou seja, $\tilde{P}_1 = 0$ para o caso em que $\vartheta = 0$. Em outras palavras, a correção em segunda ordem no inverso do gap de energia não existe na parametrização cúbica tendo em vista que o bloco H_v recobra seu caráter estritamente diagonal. Ainda na identificação com o sistema cúbico onde $E_{g1} = E_{g2} = E_g$ e $E_{g3} = E_g + \Delta_{so}$ devido ao anulamento do *split-off* do campo cristalino, as massas efetivas obedecem a um tipo de vínculo diretamente proporcional a energia do acoplamento spin-órbita,

$$\mathbf{a}_6 = \frac{2}{9} \frac{3E_g + 2\Delta_{so}}{E_g^2 (E_g + \Delta_{so})} \tilde{P}_1 \bar{P}_1^2 \Delta_{so}, \quad \mathbf{a}_7 = \frac{2}{9} \frac{3E_g + 2\Delta_{so}}{E_g^2 (E_g + \Delta_{so})} \tilde{P}_1 P_2^2 \Delta_{so}. \quad (3.51)$$

Na prática, se tivermos informações experimentais acerca das massas efetivas $\mathbf{a}_6$ e $\mathbf{a}_7$, sabendo que $\tilde{P}_1 = P_1 \sin \vartheta$ e $\bar{P}_1 = P_1 \cos \vartheta$, podemos determinar duas quantidades cruciais do problema. A primeira é dada pelo ângulo ϑ caracterizando a parametrização quase-cúbica, introduzida na formulação do modelo de Kane no capítulo 2. A segunda diz respeito ao parâmetro de Kane P_2 , quantidade essencial no modelo de Kane em sistemas hexagonais e que não há muito consenso nas referências acerca de valores experimentais ou analíticos.

Substituindo (3.48) e (3.44) na equação (3.42), encontramos finalmente o hamiltoniano efetivo que descreve um elétron na banda de condução de um semiconductor na fase *bulk*,

$$H = \left(\mathbf{a}_1 k_{||}^2 + \mathbf{a}_2 k_z^2 \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} + \left(\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2 \right) \sigma_z - \mathbf{a}_5 k_z \Sigma + \left(\mathbf{a}_6 k_{||}^2 + \mathbf{a}_7 k_z^2 \right) (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y). \quad (3.52)$$

Uma característica peculiar a respeito deste resultado está na presença de três interações dependentes em spin no hamiltoniano efetivo que competem entre si. Outro aspecto interessante está na presença de termos cúbicos em k associados a correção de segunda ordem em conjunção com a usual dependência quadrática nas componentes do vetor de

onda.

3.3 Renormalização

Na seção 3.1 o *folding down* foi introduzido e utilizado com a premissa de nos levar à equação efetiva que descreve o comportamento de um elétron de condução. Apenas para relembrar, a idéia central do método consiste em desacoplar as bandas de condução e valência partindo da representação do hamiltoniano de Kane em blocos matriciais separados em setores correspondentes a acoplamentos intra e interbandas. Sem muita dificuldade, a conexão encontrada entre o espinor da banda de valência ψ_v e a banda de condução é mediada pela equação matricial

$$\psi_v = (E\mathbf{1}_{6\times 6} - H_v)^{-1} H_{cv}^\dagger \psi_0 , \quad (3.53)$$

resultado que nos permitiu chegar imediatamente a expressão para a componente espinorial ψ_0 , a saber,

$$H_c \psi_0 + H_{cv} (E\mathbf{1}_{6\times 6} - H_v)^{-1} H_{cv}^\dagger \psi_0 = E\mathbf{1}_{2\times 2} \psi_0 . \quad (3.54)$$

Agregando esta equação ao processo de linearização dos denominadores de energia conseguimos de fato apresentar uma solução bastante razoável para nosso problema inicial. A menos de uma eventual dificuldade de convergência na expansão em séries de potências que adotamos*, não há nenhuma inconsistência nos cálculos desenvolvidos até o momento. Entretanto, existe uma quantidade física muito sutil vinculando os espinores que caracterizam as bandas de condução e valência e que ainda não foi levada em consideração: a densidade de probabilidade $\Psi^\dagger \Psi$. Em outras palavras, o *folding down* não desacopla totalmente os espaços vetoriais relativos a cada banda de energia. A probabilidade de encontrar o elétron de condução em alguma região do espaço deve ser normalizada à

*Respeitando a hipótese em que tratamos o gap E_g como a maior de todas as energias envolvidas no problema, particularmente no que se refere a seleção dos materiais semicondutores onde a aproximação é razoável, a convergência na linearização dos denominadores de energia será eficiente.

unidade,

$$\int \Psi^\dagger \Psi d^3\mathbf{r} = \int (\psi_0^\dagger \psi_0 + \psi_v^\dagger \psi_v) d^3\mathbf{r} = 1 . \quad (3.55)$$

A equação (3.53) expressa a dependência mais imediata entre cada banda vinda diretamente do *folding down* e nos permite escrever

$$\int \psi_0^\dagger [\mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{cv}(E\mathbf{1}_{6 \times 6} - H_v)^{-2} H_{cv}^\dagger] \psi_0 d^3\mathbf{r} = 1 . \quad (3.56)$$

Adianto ao leitor que através desta integral obteremos uma correção à componente espinorial ψ_0 em ordens no inverso do gap de energia que pode ser entendida como um tipo de renormalização. Na realidade, este resultado não deve ser encarado em tom de surpresa ou espanto uma vez que procedimento similar é utilizado para determinar a devida correção ao espinor relativo a equação de Pauli vinda da equação de Dirac no limite de baixas velocidades (16, 48). Para tanto, a equação (3.56) pode ser reescrita na forma

$$\int \psi_0^\dagger [\mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{cv}(E\mathbf{1}_{6 \times 6} - H_v)^{-2} H_{cv}^\dagger]^{1/2} [\mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{cv}(E\mathbf{1}_{6 \times 6} - H_v)^{-2} H_{cv}^\dagger]^{1/2} \psi_0 d^3\mathbf{r} = 1 . \quad (3.57)$$

Para simplificar os cálculos, podemos definir naturalmente o operador hermiteano

$$\Lambda = [\mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{cv}(E\mathbf{1}_{6 \times 6} - H_v)^{-2} H_{cv}^\dagger]^{1/2} , \quad (3.58)$$

de tal maneira que a integral da densidade de probabilidade associada ao espinor Ψ resulta

$$\int (\Lambda \psi_0)^\dagger (\Lambda \psi_0) d^3\mathbf{r} = 1 . \quad (3.59)$$

Através do *folding down*, a conservação de probabilidade relativa ao espinor Ψ implica naturalmente uma correção a componente espinorial ψ_0 associada a densidade de probabilidade de encontrar o elétron de condução em uma dada região do espaço. Como dito nos parágrafos precedentes, o espinor que descreve a banda de condução deve ser renormalizado (43),

$$\psi_0 = [\mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{cv}(E\mathbf{1}_{6 \times 6} - H_v)^{-2} H_{cv}^\dagger]^{-1/2} \psi_{s0} . \quad (3.60)$$

Vale lembrar que todos os cálculos que desenvolvemos até este ponto são exatos e independentes de características específicas das matrizes envolvidas. Entretanto, como discutimos

nas seções anteriores, o bloco matricial H_v apresenta um setor diagonal cujos elementos podem ser escolhidos como parâmetro de ordem numa expansão da equação (3.60) em séries de potências. Recorrendo a mesma álgebra que utilizamos na seção 3.2.1, temos

$$\psi_0 = \left(\mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-2} H_{cv}^\dagger + \dots \right)^{-1/2} \psi_{s0} . \quad (3.61)$$

Uma vez que $\tilde{H}_{vD}^{-2} \propto E_g^{-2}$, é suficiente truncar a expansão até o primeiro termo não-nulo. A consequência direta desta aproximação será permitir a expansão binomial do operador resultante em ordens no inverso do gap de energia. Novamente, a consistência deste procedimento nos limita aos primeiros termos da soma infinita,

$$\psi_0 = \psi_{s0} - \frac{1}{2} H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-2} H_{cv}^\dagger \psi_{s0} + \mathcal{O}(E_g^{-4}) + \dots \quad (3.62)$$

Em outras palavras, a renormalização da componente espinorial relativa a banda de condução possui influência direta apenas em correções de segunda ordem no inverso do gap de energia, não interferindo nos resultados obtidos para o hamiltoniano em primeira ordem apresentados na seção 3.2.1 dado que $\psi_0 = \psi_{s0}$. De fato, o termo proporcional a E_g^{-2} é responsável pelo cancelamento de alguns termos vindos do *folding down* no cálculo do hamiltoniano efetivo em segunda ordem.

Para encerrar a discussão e pautar a relevância deste resultado, frisamos que a componente ψ_{s0} se caracteriza fisicamente como a subbanda de condução renormalizada independentemente de qualquer aproximação, cuja densidade de probabilidade é exatamente igual aquela associada ao espinor Ψ .

Tendo em vista este cenário, no capítulo 4 estudaremos as soluções da equação efetiva em primeira ordem partindo de um modelo de subbandas. Na prática, a idéia se resume em calcular os autoestados de H a partir de um dado número de estados ligados confinados no poço quântico formado pela junção semicondutora.

Capítulo 4

Estrutura eletrônica da banda de condução

No capítulo anterior determinamos a equação efetiva que descreve um elétron na banda de condução para um material semiconductor de estrutura hexagonal, em particular de rede wurtzita, por meio do *folding down* e de linearizações até primeira ordem de aproximação nos denominadores de energia envolvidos.

Para estudar as soluções da respectiva equação efetiva, começaremos reescrevendo o hamiltoniano efetivo em primeira ordem na base que diagonaliza o operador helicidade. Este procedimento tornará mais simples as soluções da equação efetiva associadas ao movimento orbital. Projetando o hamiltoniano efetivo no espaço gerado por estas soluções e aquelas vindas da parte dependente de spin na equação efetiva, teremos um modelo de subbandas que nos dará informações acerca do espectro de energias e dos autoestados de H . Em particular, no contexto de um heteroestrutura, discutiremos em detalhes os modelos de uma e duas subbandas para o poço quântico. Terminaremos o capítulo analisando os resultados para a monoestrutura.

4.1 O hamiltoniano efetivo na base do operador helicidade

Conforme determinamos no capítulo 3, o hamiltoniano efetivo em primeira ordem de correção no inverso do gap de energia descrevendo um elétron na banda de condução de um material semiconductor de estrutura hexagonal, em particular do tipo wurtzita, pode ser escrito na forma

$$H = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} k_z^2 + V_0(z) \right\} \mathbb{1}_{2 \times 2} + \left\{ \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} k_z^2 \right\} \sigma_z - \gamma_{1,12} \Sigma k_z. \quad (4.1)$$

As massas efetivas, funções dos gaps de energia e também dos dois parâmetros de Kane presentes no modelo, podem ser consultadas no conjunto de equações (3.36)–(3.39), enquanto Σ representa o operador helicidade no plano dado em (3.31).

Visando facilitar sua análise, podemos dividir o hamiltoniano efetivo em duas parcelas tendo em vista a natureza distinta de cada uma de suas contribuições. A primeira delas, diagonal, ainda é separável em dois outros membros, um dependente da identidade $\mathbb{1}_{2 \times 2}$ e outro ao operador σ_z . O termo proporcional a matriz identidade está diretamente relacionado ao hamiltoniano que descreve o confinamento do elétron de condução no poço de potencial formado pelas junções da heteroestrutura semicondutora. Analogamente, a interação dependente do operador σ_z também possui vínculo com quantidades associadas ao poço quântico. Entretanto, como este termo não existe na correspondência com o caso cúbico uma vez que o *split-off* do campo cristalino é identicamente nulo na estrutura de bandas destes materiais, somos motivados a tratá-lo independentemente do anterior.

A última contribuição representa uma interação dependente em spin caracterizada pelo operador helicidade no plano que, além de aparecer já em primeira ordem de aproximação, é o único termo não-diagonal no hamiltoniano efetivo. Outro aspecto interessante desta interação está na dependência linear com a componente k_z do vetor de onda que, segundo a aproximação das funções envelope, passa a se comportar como um operador, ou seja, $k_z = -i d/dz$. Em sistemas com simetria cúbica o acoplamento spin-órbita surge apenas

quando os efeitos de segunda ordem são levados em conta, além de emergir na figura das interações Dresselhaus (21) ou Rashba (22). Em relação ao modelo de subbandas que passaremos a estudar na próxima seção, adianto ao leitor que k_z será responsável pelo surgimento de uma interação dependente de spin ligeiramente diferente daquele observado em sistemas cúbicos.

Como o operador helicidade representa a única parcela não-diagonal do hamiltoniano H , a transformação de similaridade na qual Σ possui representação diagonal é dada pela matriz

$$\Lambda = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} +e^{-i\vartheta} & -e^{-i\vartheta} \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad e^{\pm i\vartheta} = \frac{k_{\pm}}{k_{\parallel}}. \quad (4.2)$$

A ação da transformação de similaridade dada pela matriz unitária Λ em (4.2) no operador helicidade leva à forma diagonal

$$\Lambda^{-1}\Sigma\Lambda = \Lambda^{-1}(k_x\sigma_x + k_y\sigma_y)\Lambda = k_{\parallel}\sigma_z. \quad (4.3)$$

Em outras palavras, o operador helicidade satisfaz a equação de autovalor

$$\Sigma|\pm\rangle = \pm k_{\parallel}|\pm\rangle, \quad (4.4)$$

cujos respectivos autovetores são

$$|\pm\rangle = \frac{\pm e^{-i\vartheta}|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (4.5)$$

Buscando simplificar os cálculos, estamos utilizando a notação comumente utilizada nos textos de mecânica quântica (16) para definir os vetores $|\downarrow\rangle$ e $|\uparrow\rangle$ autoestados de σ_z

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z|\uparrow\rangle = +|\uparrow\rangle, \quad \sigma_z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle. \quad (4.6)$$

O próximo passo consiste submeter todos os demais termos do hamiltoniano efetivo a transformação de similaridade que diagonaliza Σ , ou seja, devemos calcular $\widetilde{H} = \Lambda^{-1}H\Lambda$. Na realidade, o operador σ_z representa a maior de nossas preocupações uma vez que a matriz identidade é invariante a qualquer operação. No apêndice C generalizamos a ação da transformação caracterizada por Λ em relação a uma matriz de elementos arbitrários.

Particularmente para o operador σ_z ,

$$\Lambda^{-1}\sigma_z\Lambda = -\sigma_x . \quad (4.7)$$

O leitor pode perceber que o comportamento não-diagonal do operador helicidade é imediatamente transferido para o operador σ_x na transformação de similaridade. Assim, o hamiltoniano efetivo em primeira ordem projetado na base do operador helicidade é

$$\widetilde{H} = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}}k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}}k_z^2 + V_0(z) \right\} \mathbf{1}_{2 \times 2} - \left\{ \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}}k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}}k_z^2 \right\} \sigma_x - \gamma_{1,12}k_{\parallel}k_z\sigma_z . \quad (4.8)$$

Por questões de praticidade durante o estudo do modelo de subbandas que iniciaremos na próxima seção, vamos dividir o hamiltoniano $\widetilde{H}$ em duas parcelas distintas,

$$\widetilde{H} = H_d \mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{nd} . \quad (4.9)$$

Analogamente a situação que antecede a projeção na base de estados da helicidade, H_d descreve o hamiltoniano associado ao confinamento do elétron de condução no poço quântico formado pela junção semicondutora,

$$H_d = \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}}k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}}k_z^2 + V_0(z) . \quad (4.10)$$

Por outro lado, H_{nd} define a parte não-diagonal do hamiltoniano efetivo que também possui quantidades associadas ao poço quântico e corresponde a interação dependente de spin em primeira ordem de aproximação,

$$H_{nd} = H_{nd1} + H_{nd2} , \quad (4.11)$$

onde H_{nd1} é proporcional ao operador σ_x ,

$$H_{nd1} = - \left\{ \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}}k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}}k_z^2 \right\} \sigma_x , \quad (4.12)$$

e H_{nd2} depende diretamente do operador σ_z ,

$$H_{nd2} = -\gamma_{1,12}k_{\parallel}k_z\sigma_z . \quad (4.13)$$

A partir da próxima seção nos dedicaremos ao estudo das soluções da equação efetiva associada ao hamiltoniano $\widetilde{H}$.

4.2 Heteroestruturas

O crescimento de camadas de materiais semicondutores em relação a um substrato permite obter estruturas de baixa dimensionalidade que são perfeitamente capazes de confinar elétrons. As diferenças nas propriedades físicas dos materiais na junção, particularmente no que se refere a estrutura de bandas de cada um, originam as chamadas heteroestruturas semicondutoras. O avanço de técnicas de crescimento epitaxial tem permitido o desenvolvimento de heteroestruturas cada vez mais sofisticadas e interessantes do ponto de vista comercial.

Dentre o conjunto de todas as heteroestruturas semicondutoras*, o poço quântico se destaca como aquela mais simples. De maneira geral, o poço quântico pode ser entendido como um arranjo sequencial de no mínimo três camadas semicondutoras crescidas de tal forma a manter um alinhamento paralelo entre suas interfaces. O material central possui gap de energia bem menor quando comparado aquele dos semicondutores nas extremidades da junção. Na prática, a interação na qual os elétrons estarão sujeitos na região central tem o perfil do potencial que descreve um poço quântico usual. Nesta estrutura formam-se então níveis de estados ligados cujo número e espaçamento dependem intimamente da geometria do poço através de sua altura e largura. Atribuiremos aos estados ligados do poço o título de subbandas.

Através da aproximação de Hartree (46) reduzimos o problema de muitos corpos ao caso de uma única partícula acrescentando ao sistema a interação do elétron com a densidade de carga eletrônica total. Esta interação é caracterizada por um potencial eletrostático usualmente chamado *potencial de Hartree*, dado por $V_H(z)$. A presença do potencial de Hartree em $V_0(z)$ no termo H_d será efetivamente a única diferença deste com o caso que descreve o confinamento eletrônico em um poço de potencial usualmente tratado nos

*As heteroestruturas mais tradicionais incluem o poço, o fio e o ponto quântico. Há um recente interesse por estruturas com grau de complexidade um pouco maior como é o caso do *politipismo*, uma série de junções de estruturas semicondutoras com propriedades de simetria diferentes. A situação que tem atraído atenção é aquela formada por redes zincblende (Z) e wurtzita (W), ou seja, $WZWZWZ\dots$

textos mais tradicionais de mecânica quântica, ou seja,

$$V_0(z) = V_H(z) + \nu_0(z) . \quad (4.14)$$

O problema que realmente nos propomos a resolver a partir do final da última seção se resume ao cálculo da relação de dispersão e dos autoestados relativos ao hamiltoniano $\widetilde{H}$ associado ao elétron de condução. Entretanto, esta tarefa será bem mais fácil se conhecermos a representação matricial deste hamiltoniano relativamente a uma dada base de estados previamente conhecida. De fato, por simplicidade, podemos escolher a base formada pelos estados ligados do poço quântico representado por H_d degeneradas pelos estados de spin vindos do operador σ_z . Como o resultado será arbitrário quanto ao número de subbandas, consideraremos em seguida um conjunto finito de autofunções do poço de modo a truncar a base usada nos cálculos.

Vamos começar então calculando as soluções da equação de autovalor relativa ao confinamento do elétron de condução no poço,

$$H_d \psi(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{r}) , \quad (4.15)$$

onde $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$ equivale a energia e $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$ corresponde a função de onda do elétron. Propondo a solução $\psi(\mathbf{r}) = f(x, y) u(z)$ para a equação diferencial ordinária definida em (4.15), podemos mostrar facilmente através do método de separação de variáveis usual que a solução no plano xy descreve a função de onda relativa ao movimento de uma partícula livre,

$$f(x, y) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{S}}} e^{i\mathbf{k}_{||} \cdot \mathbf{r}} , \quad (4.16)$$

onde $\mathbf{k}_{||} = (k_x, k_y)$ define o vetor de onda no plano e $\mathcal{S}$ representa a área do poço quântico correspondente a normalização da função $f(x, y)$. A relação de dispersão varia em termos das coordenadas do vetor de onda no plano através da relação $\hbar^2 k_{||}^2 / 2m_{||}$. Analogamente, ainda via o método de separação de variáveis, a componente dependente em z da função de onda satisfaz a equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \frac{d^2}{dz^2} u_n(z) + V_0(z) u_n(z) = \left(\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \frac{\hbar^2}{2m_{||}} k_{||}^2 \right) u_n(z) = \mathcal{E}_n u_n(z) . \quad (4.17)$$

Associado as soluções desta equação diferencial está um conjunto de energias permitidas $\mathcal{E}_n$ classificadas pelo natural $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$, ou seja, o espectro da partícula relativo ao movimento em z é portanto discretizado. Uma vez que o índice n rotula também a função $\psi(\mathbf{r})$, nada mais natural que escrever a autofunção geral de H_d na forma

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{S}}} e^{i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{r}} u_n(z) . \quad (4.18)$$

Enquanto os elétrons estão totalmente livres para se movimentar no plano xy associado a camada semicondutora central e a relação de dispersão varia continuamente nesta região, a energia relativa ao movimento destes portadores paralelamente a direção do eixo z de crescimento é quantizada assumindo valores discretos. Em outras palavras, o poço quântico confina um gás de elétrons bidimensionalmente.

A partir destes resultados podemos construir a base $\{|\psi_n, s\rangle\}$ que servirá de referência para determinar a projeção do hamiltoniano $\widetilde{H}$. Apenas para deixar claro, o índice s refere-se ao grau de liberdade de spin introduzido pelo acoplamento spin-órbita. Em linhas gerais, um estado arbitrário desta base é dado em termos das autofunções do poço quântico $\{|\psi_n\rangle\}$ e pelos autoestados $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ do operador σ_z relativos ao espaço de spins. Como estamos lidando com espaços vetoriais distintos,

$$|\psi_n, s\rangle = |\psi_n\rangle \otimes |s\rangle . \quad (4.19)$$

A próxima etapa consiste em calcular a projeção de cada parcela de $\widetilde{H}$ nos elementos da base $\{|\psi_n, s\rangle\}$, o que faremos separadamente visando simplificar os cálculos. Começando por H_d , é evidente que o resultado desta projeção apresentará apenas contribuições diagonais relativas aos níveis de energia do poço quântico uma vez que sua dependência no subespaço de spin é proporcional à matriz identidade. Assim,

$$\langle \psi_n, l | H_d \mathbf{1}_{2 \times 2} | \psi_m, s \rangle = \langle \psi_n | H_d | \psi_m \rangle \langle l | \mathbf{1}_{2 \times 2} | s \rangle = \left(\mathcal{E}_n + \frac{\hbar^2}{2m_\parallel} k_\parallel^2 \right) \delta_{n,m} \delta_{l,s} . \quad (4.20)$$

Passando para o termo $H_{nd} = H_{nd1} + H_{nd2}$, este exhibe um comportamento ligeiramente distinto do caso anterior por possuir duas componentes que atuam não-trivialmente no

espaço de spin dos estados da base. Começando por H_{nd1} dado em (4.12), temos

$$\langle \psi_n, l | H_{nd1} | \psi_m, s \rangle = - \left\{ \frac{\hbar^2}{2M_{||}} \langle \psi_n | k_{||}^2 | \psi_m \rangle + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} \langle \psi_n | k_z^2 | \psi_m \rangle \right\} \langle l | \sigma_x | s \rangle . \quad (4.21)$$

Deixando mais claro, o operador σ_x muda a orientação do grau de liberdade de spin do estado a partir das relações

$$\sigma_x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle , \quad \sigma_x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle . \quad (4.22)$$

Em virtude deste resultado, a representação matricial de H_{nd1} nesta base contribui para $\widetilde{H}$ exclusivamente com termos não-diagonais,

$$\langle \psi_n, l | H_{nd1} | \psi_m, s \rangle = - \left\{ \frac{\hbar^2}{2M_{||}} k_{||}^2 \delta_{n,m} + \beta_{mn} \right\} (1 - \delta_{l,s}) , \quad (4.23)$$

onde o parâmetro β_{mn} é

$$\beta_{mn} = \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} \langle u_n | k_z^2 | u_m \rangle . \quad (4.24)$$

Para o caso em que $n = m$, o parâmetro β_{nn} apresenta forma semelhante àquela observada para o acoplamento de Dresselhaus em materiais semicondutores de simetria cúbica, em especial redes zincblende (8). Entretanto, a influência da simetria hexagonal deste problema acrescenta ligeiras modificações a este termo, especialmente no que diz respeito a massa efetiva $M_{\perp}$. Existe uma maneira alternativa de escrever β_{mn} se voltarmos à equação (4.17) vinda do método de separação de variáveis,

$$- \frac{d^2}{dz^2} u_m(z) = \frac{2m_{\perp}}{\hbar^2} [\mathcal{E}_m - V_0(z)] u_m(z) . \quad (4.25)$$

Esta identidade mostra que o acoplamento de Dresselhaus descreve essencialmente a diferença entre o valor esperado do potencial auto-consistente calculado em cada subbanda e as respectivas autoenergias de cada estado,

$$\beta_{mn} = \frac{m_{\perp}}{M_{\perp}} [\mathcal{E}_n \delta_{m,n} - \langle u_n | V_0(z) | u_m \rangle] . \quad (4.26)$$

Na referência (42) os autores determinam o acoplamento de Dresselhaus associado às duas primeiras subbandas de um poço quântico na junção $Al_{0.48}In_{0.52}As/Ga_{0.47}In_{0.53}As$, mostrando que se comportam praticamente como constantes em ambos os sistemas.

Assim como no caso que acabamos de discutir, H_{nd2} também atua no subespaço de spin,

$$\langle \psi_n, l | H_{nd2} | \psi_m, s \rangle = -\gamma_{1,12} \langle \psi_n | k_{||} k_z | \psi_m \rangle \langle l | \sigma_z | s \rangle . \quad (4.27)$$

De todas as componentes do vetor de onda, somente k_z se comporta como um operador e atua nas autofunções do poço. Por outro lado, o operador σ_z acopla apenas estados com o mesmo grau de liberdade de spin de tal forma que a projeção de H_{nd2} na base $\{|\psi_n, s\rangle\}$ possui componentes puramente diagonais,

$$\langle \psi_n, l | H_{nd2} | \psi_m, s \rangle = -s\gamma_{1,12} \langle u_n | k_z | u_m \rangle k_{||} \delta_{l,s} . \quad (4.28)$$

Note que o número quântico s pode assumir os valores ± 1 devido a ação de σ_z nos estados $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, respectivamente. A partir desta expressão, o elemento de matriz da componente k_z do vetor de onda passará a ser designado como acoplamento dependente de spin e escrito na forma

$$\eta_{nm} = \gamma_{1,12} \langle u_n | k_z | u_m \rangle . \quad (4.29)$$

A primeira observação acerca de η_{nm} se aplica a hermiticidade da representação matricial de H_{nd2} . Sabemos que a componente k_z do vetor de onda se conecta diretamente a componente p_z do operador momentum linear via a aproximação das funções envelope, ou seja, $k_z = p_z/\hbar$. Neste sentido, a hermiticidade do operador momentum linear se estende também para a componente z do vetor de onda, $k_z = k_z^\dagger$. Assim, dada a definição fundamental de um operador hermitiano, o conjugado complexo de η_{nm} obedece a propriedade de simetria

$$\eta_{nm}^* = \gamma_{1,12} \langle u_n | k_z | u_m \rangle^* = \gamma_{1,12} \langle u_m | k_z^\dagger | u_n \rangle = \eta_{mn} , \quad (4.30)$$

Consequentemente, a projeção de H_{nd2} na base de estados é, portanto, hermitiana,

$$\langle \psi_m, l | H_{nd2} | \psi_n, s \rangle = \langle \psi_n, l | H_{nd2} | \psi_m, s \rangle^* = \langle \psi_m, l | H_{nd2}^\dagger | \psi_n, s \rangle . \quad (4.31)$$

Antes de substituir (4.29) na equação (4.28) e colocar um ponto final em nosso raciocínio, existe uma maneira bem mais simples de escrever o acoplamento dependente de spin η_{nm} que traz à tona sua dependência com o plano complexo. Uma vez que k_z é concebido

como um operador diferencial, temos

$$\eta_{nm} = -i\gamma_{1,12}\langle u_n | \frac{d}{dz} | u_m \rangle = -i\gamma_{1,12}|\langle u_n | k_z | u_m \rangle| = -i|\eta_{nm}|. \quad (4.32)$$

Em linhas gerais, este resultado mostra que o acoplamento dependente de spin é um número imaginário puro. A partir dele, a projeção do termo H_{nd2} na base de estados $\{|\psi_n, s\rangle\}$ dada na equação (4.28) pode ser imediatamente reescrita na forma

$$\langle \psi_n, l | H_{nd2} | \psi_m, s \rangle = is|\eta_{nm}|k_{||}\delta_{l,s}. \quad (4.33)$$

Cabe aqui ressaltar algumas características importantes a respeito do acoplamento dependente de spin η_{nm} . Para o caso em que $n \neq m$, o elemento de matriz η_{nm} acopla duas subbandas diferentes e é conhecido como acoplamento intersubbandas. Adianto ao leitor que este termo não está presente na situação que envolve apenas uma subbanda e será responsável pela dependência em spin no espectro de energias e autoestados de $\widetilde{H}$ quando truncarmos a base de estados ao caso de duas subbandas. Quando $n = m$, então o elemento de matriz acopla o mesmo autoestado de H_d e passa a ser conhecido como acoplamento intrasubbanda. Curiosamente, em consonância com (4.30) a equação (4.32) nos leva a concluir que este acoplamento é identicamente nulo, ou seja, $\eta_{mm} = 0$.

Para finalizar, existe uma diferença primordial entre o acoplamento dependente de spin que definimos a pouco e aquele presente em sistemas cúbicos (41, 43), particularmente o famoso acoplamento spin-órbita de Rashba (22). Aqui, o termo η_{nm} representa um elemento de matriz onde o operador k_z atua diretamente nas autofunções de H_d . Contrariamente, no sistema cúbico o acoplamento spin-órbita é dado em termos do elemento de matriz da ação de k_z no potencial $V_0(z)$, isto é,

$$\eta_{nm} \propto \langle \psi_n | \frac{dV_0}{dz} | \psi_m \rangle. \quad (4.34)$$

A partir das equações (4.23) e (4.33) podemos então escrever uma expressão geral para o elemento de matriz do hamiltoniano H_{nd} , a saber,

$$\langle \psi_n, l | H_{nd} | \psi_m, s \rangle = - \left\{ \frac{\hbar^2}{2M_{||}} k_{||}^2 \delta_{n,m} + \beta_{mn} \right\} (1 - \delta_{l,s}) + is|\eta_{nm}|k_{||}\delta_{l,s}. \quad (4.35)$$

A esta altura deve estar claro ao leitor que os resultados apresentados no decorrer desta

seção possuem um caráter geral e valem a princípio para um número arbitrário de subbandas do poço quântico. O número de autofunções de H_d , dada a degenerescência por spin, dita a dimensão da representação matricial de $\widetilde{H}$. A partir da próxima seção vamos escolher a base $\{|\psi_n, s\rangle\}$ contendo um número reduzido de vetores de estado, o que nos permitirá calcular as energias e as autofunções do hamiltoniano efetivo.

4.2.1 Uma subbanda

Nesta seção consideraremos o caso em que o poço quântico admite apenas um estado ligado. Sem dúvida, esta representa uma das situações físicas mais simples no que se refere ao confinamento eletrônico em heteroestruturas semicondutoras, seja no aspecto de reprodução experimental quanto na descrição algébrica dos autoestados e da relação de dispersão. Entretanto, a emergência da interação spin-órbita de Rashba em sistemas cúbicos com uma subbanda (22, 23) se destaca como motivação preponderante no estudo de toda a essência da física envolvida nestas estruturas.

A base de estados que utilizaremos agora para descrever este modelo consiste de um único estado do poço quântico, em particular o estado fundamental $u_0(z)$, degenerado pelos autoestados de spin do operador σ_z , ou seja, $\{|u_0, \uparrow\rangle, |u_0, \downarrow\rangle\}$. A representação do hamiltoniano efetivo nesta base é

$$\widetilde{H} = \left(\mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} k_{\parallel}^2 \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} - \left(\beta_{00} + \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} k_{\parallel}^2 \right) \sigma_x, \quad (4.36)$$

onde β_{00} é definido através da relação

$$\beta_{00} = \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} \langle u_0 | k_z^2 | u_0 \rangle \quad (4.37)$$

e pode ser interpretado como o acoplamento de Dresselhaus (8) analogamente ao caso cúbico. Além de possuir uma dependência quadrática em relação ao parâmetro de Kane P_2 , expressa através da massa efetiva $M_{\perp}$ dada em (3.38), β_{00} também é função da diferença de quantidades ligadas diretamente a estrutura de bandas do material semicondutor,

como o gap de energia E_g e o *split-off* do campo cristalino Δ_c . Note ainda que o termo contendo a helicidade não contribui para o hamiltoniano efetivo (4.36), pois $\eta_{00} = 0$, como vimos em (4.34).

Se comparada ao caso cúbico, a representação do hamiltoniano efetivo na base de uma subbanda na equação (4.36) se reduziria apenas ao termo dependente da matriz identidade uma vez que a única degenerescência na banda de valência destes materiais é devida a interação spin-órbita, ou seja, o termo de *split-off* do campo cristalino é identicamente nulo. Este resultado pode ser verificado facilmente através da equação (3.38) que descreve as massas efetivas $M_{||}$ e $M_{\perp}$.

Uma vez que parte do hamiltoniano efetivo é proporcional a identidade, diagonalizar (4.36) corresponde a encontrar a transformação de similaridade que diagonaliza σ_x . Esta operação é caracterizada pela matriz unitária T dada por

$$T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad T^{-1} \sigma_x T = \mathbf{1}_{2 \times 2}. \quad (4.38)$$

Desta forma, as energias podem ser escritas de maneira geral como

$$E_{\mu}(k_{||}) = \mathcal{E}_0 + \mu\beta_{00} + \left(\frac{\hbar^2}{2m_{||}} + \mu \frac{\hbar^2}{2M_{||}} \right) k_{||}^2, \quad (4.39)$$

onde $\mu = \pm$ está ligado a multiplicidade da relação de dispersão frente aos graus de liberdade de spin, respectivamente aos estados spin *up* e spin *down*. Dada a dependência quadrática nas componentes do vetor de onda no plano, a relação de dispersão descreve uma superfície de energia na forma de um parabolóide de revolução com mínimo em $k_{||} = 0$ no espaço de momentos. O *splitting* nas energias, ou seja, a separação entre as superfícies de energia E_+ e E_- , é dado por

$$\Delta E(k_{||}) = E_+(k_{||}) - E_-(k_{||}) = 2 \left(\beta_{00} + \frac{\hbar^2}{2M_{||}} k_{||}^2 \right). \quad (4.40)$$

Como esta separação nas superfícies de energia se deve a degenerescência por spin, é costume cunhar o termo *spin-splitting* ao se referir a este resultado. Além de possuir uma dependência estritamente quadrática em relação a $k_{||}$, o *splitting* nas energias é diferente

de zero para o caso em que $k_{||} = 0$, ou seja,

$$\Delta E(0) = 2\beta_{00} . \quad (4.41)$$

Em conjunção com dados experimentais acerca do *splitting* nas energias de materiais de rede wurtzita, este resultado pode fornecer informações a respeito do parâmetro de Kane P_2 . Isto pode ser feito substituindo (3.38) na equação anterior de modo a obter uma expressão analítica para P_2 em termos do *splitting* e de parâmetros que dependem inteiramente da estrutura de bandas do material analisado,

$$P_2 = \left[\frac{3E_g(E_g + \Delta_c) \Delta E(0)}{2\Delta_c \langle u_0 | k_z^2 | u_0 \rangle} \right]^{1/2} . \quad (4.42)$$

Agora que determinamos a forma das superfícies de energia associadas ao caso de uma heteroestrutura semicondutora de rede wurtzita com uma subbanda, vamos comparar estes resultados àqueles encontrados através do mesmo método para materiais semicondutores de rede zinblende (42,43). Além de pontuar as principais diferenças, tentaremos traçar eventuais paralelos entre os sistemas hexagonal e cúbico.

A relação de dispersão para o caso de uma subbanda em materiais de estrutura zinblende pode ser escrita na forma (42,43)

$$E_{\pm}(k_{||}) = \frac{\hbar^2}{2m_{||}^*} k_{||}^2 \pm \alpha k_{||} , \quad (4.43)$$

onde α representa a constante de acoplamento de Rashba (22). A massa efetiva $m_{||}^*$ possui correções em primeira ordem no inverso do gap de energia aliadas a contribuições de bandas remotas. A primeira diferença entre os resultados está na presença do termo linear em $k_{||}$ nas energias do caso zinblende, o que não ocorre no sistema wurtzita. Este termo linear será responsável pelo anulamento do *spin-splitting* nas superfícies de energia em $k_{||} = 0$ para o sistema zinblende.

Na figura 4.1 representamos as superfícies de energia para os sistemas wurtzita 4.1(a) e zinblende 4.1(b) para o caso em que $k_y = 0$, ou seja, $k_{||} = k_x$. Como pode ser verificado através da figura, cada superfície de energia no caso wurtzita é suave em $k_{||} = 0$, enquanto o sistema zinblende apresenta um cúspide em torno deste mesmo ponto. Além disso, o spin splitting é diferente em ambos os casos: enquanto possui dependência quadrática em

$k_{||}$ e é não-nulo em $k_{||} = 0$ no sistema wurtzita, no caso zinblende varia linearmente com $k_{||}$ e é identicamente nulo em $k_{||} = 0$. Outra característica divergente em ambos sistemas

Figura 4.1 – Superfícies de energia dependentes de spin para os sistemas (a) wurtzita e (b) zinblende. As figuras em cada painel mostram o corte $k_y = 0$, ou seja, $k_{||} = k_x$, no plano das superfícies de energia.

está associada as polarizações devido a spin. Apenas para deixar claro, o operador de spin $\mathbf{S}$ é

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) . \quad (4.44)$$

Como o hamiltoniano $\widetilde{H}$ está representado na base do operador helicidade sob ação da matriz Λ , manteremos portanto a mesma coerência calculando as componentes do novo operador de spin $\overline{\mathbf{S}} = \Lambda^\dagger \mathbf{S} \Lambda$, ou seja,

$$\overline{S}_x = \frac{\hbar}{2k_{||}} (k_x \sigma_z - k_y \sigma_y) , \quad \overline{S}_y = \frac{\hbar}{2k_{||}} (k_y \sigma_z + k_x \sigma_y) , \quad \overline{S}_z = -\frac{\hbar}{2} \sigma_x . \quad (4.45)$$

Uma vez que a cada “ramo” da relação de dispersão do hamiltoniano $\widetilde{H}$ está associado um valor de μ referente aos estados spin *up* ($\mu = +$) e spin *down* ($\mu = -$), existe portanto um vetor de polarização por spin $\langle \overline{\mathbf{S}} \rangle$ para cada um deles, onde

$$\langle \overline{\mathbf{S}} \rangle_i = \text{Tr} (\rho_i \overline{\mathbf{S}}) , \quad (4.46)$$

o índice $i \in \{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ classifica os autoestados de spin do operador σ_z e ρ_i é o operador

densidade inerente (59),

$$\rho_{\uparrow} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \rho_{\downarrow} = |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (4.47)$$

Substituindo (4.45) e (4.47) na equação (4.46), especificando ainda o índice l , temos em mãos os vetores de polarização para os estados spin *up* e *down* na rede wurtzita,

$$\langle \bar{\mathbf{S}} \rangle_{\uparrow} = +\frac{\hbar}{2k_{\parallel}}(k_x, k_y, 0), \quad \langle \bar{\mathbf{S}} \rangle_{\downarrow} = -\frac{\hbar}{2k_{\parallel}}(k_x, k_y, 0). \quad (4.48)$$

Na figura 4.2 apresentamos a visão superior das superfícies de energia para os sistemas 4.2(a) wurtzita e 4.2(b) zincblende, indicando os vetores de polarização $\mathbf{S}_{\pm}(k_{\parallel})$ devido ao grau de liberdade de spin. De acordo com a figura, no sistema wurtzita as polarizações são perpendiculares às superfícies de energia, ou seja, possuem direção radial, e tangentes às superfícies de energia no caso zincblende. Entretanto, apesar desta sutil diferença, em ambos os casos as polarizações devido a spins diferentes possuem sentidos opostos.

Figura 4.2 – Vista superior das superfícies de energia para os sistemas (a) wurtzita e (b) zincblende e correspondentes vetores de polarização devido ao grau de liberdade de spin.

Para concluir esta seção e passarmos para a discussão do caso da base de estados com duas subbandas, resta ainda determinar os autoestados do hamiltoniano (4.36). Na verdade, os vetores de estado de $\widetilde{H}$ são dados em termos das colunas da matriz T associada a transformação de similaridade que diagonaliza o hamiltoniano. Entretanto, existe uma maneira mais interessante de escrever estes autovetores tornando explícita sua dependência com o único estado ligado no poço quântico e com os estados associados ao espaço de

spin. Considerando o índice $\mu = \pm$ ligado ao grau de liberdade de spin, temos

$$|u_0, \mu\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_0\rangle \otimes (|\downarrow\rangle + \mu|\uparrow\rangle) . \quad (4.49)$$

Ficará mais claro nos próximos capítulos o motivo de escrever os autoestados de $\widetilde{H}$ desta maneira, particularmente no capítulo 6 em que trataremos das taxas de transição óptica em poços quânticos e no capítulo 7 onde estudaremos o efeito *Zitterbewegung*.

4.2.2 Duas subbandas

Descrição geral do modelo

Diferentemente da situação descrita na seção anterior, acomodar dois estados ligados no poço quântico não representa uma tarefa tão simples do ponto de vista experimental. Na prática, o potencial estrutural pode ser adequadamente modificado de tal forma que os dois primeiros níveis de energia do poço quântico estejam bem próximos entre si e suficientemente distantes de todos os demais que porventura possam existir.

A base de estados na qual projetaremos o hamiltoniano $\widetilde{H}$ é formada pelo estado fundamental e o primeiro estado excitado relativos ao hamiltoniano H_d , levando em conta ainda a degenerescência devido ao grau de liberdade de spin introduzida pelos estados de σ_z . Embora não exista nenhuma prioridade na ordem em que os vetores de estado da base são apresentados, adotaremos por simples conveniência o particular ordenamento $\{|u_0, \uparrow\rangle, |u_0, \downarrow\rangle, |u_1, \uparrow\rangle, |u_1, \downarrow\rangle\}$. Note que ao invés de escrever $|\psi_n\rangle$ para nos referir as autofunções de H_d passaremos a utilizar apenas o ket $|u_n\rangle$ uma vez que a dependência no plano xy é a mesma para cada estado classificado por um natural n distinto. No que se refere ao espectro deste modelo, $\mathcal{E}_0$ representa a energia do estado fundamental e $\mathcal{E}_1$ indica a energia do primeiro estado excitado do poço. Na figura 4.3 representamos esquematicamente o cenário com o qual lidaremos nesta seção. Todas as quantidades pertinentes na descrição do caso com duas subbandas podem ser observadas, desde as

energias e autoestados até aspectos ligados à geometria do potencial confinante que pode ser em tese arbitrário. Mantendo a coerência com as seções precedentes, calcularemos separadamente a projeção de cada parcela do hamiltoniano $\widetilde{H}$ nesta base.

Figura 4.3 – Representação pictórica das autofunções associadas aos dois primeiros níveis de energia do poço quântico que confina o gás de elétrons bidimensional. Como pode ser visto pelas energias, a cor azul se relaciona a autofunção $u_0(z)$ que representa o estado fundamental. Analogamente, a cor vermelha refere-se ao primeiro estado excitado descrito por $u_1(z)$. Aqui consideramos que o domínio do potencial estrutural se limita ao intervalo $[-z_0, +z_0]$ e o parâmetro δ_0 indica a altura do poço. Embora a figura mostre um poço quadrado perfeitamente simétrico, em hipótese não fizemos ainda nenhuma restrição quanto a sua forma.

Antes de prosseguir esclareceremos um ponto que pode eventualmente gerar alguns questionamentos. De agora em diante, vamos escrever a projeção de cada parcela do hamiltoniano efetivo na base de estados em termos do produto tensorial de operadores que atuam nos espaços das autofunções do poço quântico e operadores definidos no espaço vetorial de spins. Em outras palavras, dado um operador L definido no espaço vetorial das autofunções $\{|u_n\rangle\}$ de H_d e U um operador cuja ação é restrita aos estados $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ do espaço de spins, então o produto de Kronecker $L \otimes U$ segue da propriedade geral (55)

$$(L \otimes U) |u_n, s\rangle = (L \otimes U) (|u_n\rangle \otimes |s\rangle) = (L|u_n\rangle) \otimes (U|s\rangle) . \quad (4.50)$$

Esta forma de reportar as contribuições do hamiltoniano, além de fortemente concisa e elegante, pode no futuro facilitar a diagonalização de $\widetilde{H}$ uma vez que é suficiente conhecer a equação de autovalor satisfeita por cada operador no seu respectivo espaço vetorial.

Começando pelo termo H_d , cada elemento que compõe a matriz resultante desta pro-

jeção na base de estados pode ser diretamente calculado através da equação (4.20) tal que

$$H_d = \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_{||}} + \epsilon_+ \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} \otimes \mathbf{1}_{2 \times 2} - \epsilon_- \sigma_z \otimes \mathbf{1}_{2 \times 2} , \quad (4.51)$$

onde os parâmetros $\epsilon_{\pm}$ designam a soma e a diferença das duas primeiras energias do poço quântico,

$$\epsilon_{\pm} = \frac{1}{2} (\mathcal{E}_1 \pm \mathcal{E}_0) . \quad (4.52)$$

Como já esperado, devido à maneira como escolhemos construir os vetores de estado da base, a projeção deste termo apresenta contribuições puramente diagonais com dependência quadrática no módulo $k_{||}$ do vetor de onda no plano.

De maneira similar, a representação de H_{nd1} na base de duas subbandas pode ser facilmente escrita a partir da equação (4.23),

$$H_{nd1} = - \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} + \beta_+ \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} \otimes \sigma_x + \beta_- \sigma_z \otimes \sigma_x - \beta_{01} \sigma_x \otimes \sigma_x , \quad (4.53)$$

onde os parâmetros $\beta_{\pm}$ indicam a soma e a diferença entre os acoplamentos β_{00} e β_{11} relativos, respectivamente, ao estado fundamental e ao primeiro estado excitado do poço quântico,

$$\beta_{\pm} = \frac{1}{2} (\beta_{11} \pm \beta_{00}) . \quad (4.54)$$

O leitor pode consultar a forma analítica para um dado β_{mn} arbitrário na equação (4.24). Na seção anterior argumentamos que para o caso $m = n$ este termo pode ser entendido como o acoplamento de Dresselhaus (8, 21) associado ao n -ésimo estado ligado de H_d . Vimos ainda na equação (4.26) que a essência deste acoplamento está na diferença entre o valor esperado do potencial autoconsistente $V_0(z)$ calculado para uma dada autofunção $u_n(z)$ e a respectiva energia deste nível. Contrariamente a este caso que acopla apenas estados de mesma natureza, o termo β_{01} mistura os dois níveis do poço e aparece em todas as entradas da diagonal secundária de H_{nd1} .

Para concluir, resta enfim lidar com a projeção da outra interação dependente de spin mediada por H_{nd2} . Recorrendo a equação (4.33), pode-se mostrar sem grandes dificuldades

que a representação matricial desta interação possui a forma

$$H_{nd2} = -|\eta_{01}|k_{\parallel}\sigma_y \otimes \sigma_z . \quad (4.55)$$

O parâmetro $|\eta_{01}|$ representa o acoplamento devido a interação dependente de spin entre os estados associados aos dois primeiros níveis de energia do poço quântico. Como comentamos na seção 4.2, esta quantidade pode ser interpretada analogamente ao acoplamento intersubbandas presente em materiais com simetria cúbica (24,42) e será responsável juntamente com β_{00} , β_{11} e β_{01} pela dependência em spin no espectro de $\widetilde{H}$. A característica que diferencia a natureza destes termos está essencialmente na ação da componente k_z do vetor de onda: enquanto no caso cúbico o acoplamento intersubbanda é proporcional ao elemento de matriz da derivada do potencial autoconsistente em relação a coordenada z , no sistema hexagonal depende diretamente da ação de k_z nas autofunções de H_d . Esta constitui a razão central para a ausência dos acoplamentos intrasubbanda η_{00} e η_{11} neste modelo.

Finalmente, somando as contribuições indicadas nas equações (4.51), (4.53) e (4.55) podemos escrever a matriz que descreve a projeção do hamiltoniano efetivo $\widetilde{H}$ na base de estados com duas subbandas,

$$\begin{aligned} \widetilde{H} = \mathbf{1}_{2 \times 2} \otimes \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \mathbf{1}_{2 \times 2} - \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} \sigma_x \right) k_{\parallel}^2 - |\eta_{01}|k_{\parallel}\sigma_y \otimes \sigma_z - \sigma_z \otimes (\epsilon_- \mathbf{1}_{2 \times 2} - \beta_- \sigma_x) + \\ + \mathbf{1}_{2 \times 2} \otimes (\epsilon_+ \mathbf{1}_{2 \times 2} - \beta_+ \sigma_x) - \beta_{01} \sigma_x \otimes \sigma_x . \quad (4.56) \end{aligned}$$

Note que para chegar a esta expressão rearranjamos alguns termos deixando clara a dependência do hamiltoniano com as componentes do vetor de onda no plano, separando cada produto de Kronecker da forma mais simples possível. Lembramos que enquanto os operadores à esquerda do produto $\otimes$ atuam no espaço das autofunções de pseudo-spin de H_d , os operadores à direita deste símbolo sempre atuam nos estados de spin do operador σ_z . Uma vez que $\epsilon_{\pm}$, $\beta_{\pm}$, β_{01} e $|\eta_{01}|$ representam apenas números, o hamiltoniano possui uma dependência quadrática e outra linear na componente $k_{\parallel}$ do vetor de onda. Esta última se correlaciona intimamente ao acoplamento dependente de spin intersubbanda $|\eta_{01}|$. A título de curiosidade, esta equação pode nos levar ao hamiltoniano efetivo para

o caso de uma subbanda que tratamos na seção anterior tomando alguns limites[†]. Uma outra forma de escrever a equação (4.56) consiste em atribuir seu devido caráter matricial desenvolvendo os produtos tensoriais explicitamente,

$$\widetilde{H} = \begin{bmatrix} \mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_{||}} & -\beta_{00} - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} & i|\eta_{01}|k_{||} & -\beta_{01} \\ -\beta_{00} - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} & \mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_{||}} & -\beta_{01} & -i|\eta_{01}|k_{||} \\ -i|\eta_{01}|k_{||} & -\beta_{01} & \mathcal{E}_1 + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_{||}} & -\beta_{11} - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} \\ -\beta_{01} & i|\eta_{01}|k_{||} & -\beta_{11} - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} & \mathcal{E}_1 + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_{||}} \end{bmatrix}. \quad (4.57)$$

Esta matriz guarda informações gerais acerca do espectro de energias e dos autoestados inerentes ao modelo de duas subbandas para o hamiltoniano efetivo em primeira ordem de aproximação. Entretanto, por apresentar um polinômio característico de quarta ordem completo cuja solução analítica é inviável mesmo recorrendo a ferramentas computacionais, a tarefa de diagonalizar exatamente esta matriz não é nada trivial. Adianto ao leitor que grande parte desta dificuldade algébrica é devida a presença do acoplamento β_{01} no polinômio característico resultante da equação secular

$$\det(\widetilde{H} - E\mathbf{1}_{4 \times 4}) = 0. \quad (4.58)$$

No que segue, na próxima seção focaremos nossa atenção buscando alternativas de contornar esta situação.

[†]Faça $\mathcal{E}_1 \rightarrow \mathcal{E}_0$ para obter $\epsilon_- \rightarrow 0$ e $\epsilon_+ \rightarrow \mathcal{E}_0$. Em seguida faça $\beta_{11} \rightarrow \beta_{00}$ tal que $\beta_- \rightarrow 0$ e $\beta_+ \rightarrow \beta_{00}$. Como para uma subbanda não há acoplamentos intersubbandas de nenhuma natureza, então $\beta_{01} \rightarrow 0$ e $|\eta_{01}| \rightarrow 0$ e

$$\widetilde{H} = \mathbf{1}_{2 \times 2} \otimes \left[\mathbf{1}_{2 \times 2} \left(\frac{\hbar^2}{2m_{||}} k_{||}^2 + \mathcal{E}_0 \right) - \sigma_x \left(\frac{\hbar^2}{2M_{||}} k_{||}^2 + \beta_{00} \right) \right].$$

Agora basta desprezar a identidade no produto tensorial dado que ela reflete a presença de dois possíveis estados no espaço de subbandas. Assim,

$$\widetilde{H} = \left(\frac{\hbar^2}{2m_{||}} k_{||}^2 + \mathcal{E}_0 \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} - \left(\frac{\hbar^2}{2M_{||}} k_{||}^2 + \beta_{00} \right) \sigma_x.$$

Poços quânticos simétricos

Salvo o fato de que ainda não adotamos nenhuma escolha no que tange a descrição de um material semiconductor em particular, afinal qual o aspecto físico geral que permeia a matriz $\widetilde{H}$ dada em (4.57)? Para responder a esta pergunta, vamos nos voltar ao potencial $V_0(z)$. No início do capítulo comentamos que este potencial é dado em termos da soma entre a interação autoconsistente de Hartree $V_H(z)$ e o potencial estrutural $\nu_0(z)$ que define o confinamento eletrônico na junção semicondutora,

$$V_0(z) = V_H(z) + \nu_0(z) . \quad (4.59)$$

O potencial de Hartree naturalmente se refere a interação do elétron de condução com a densidade de carga eletrônica total e é obtido via solução da equação de Poisson. O potencial $\nu_0(z)$ caracterizando o poço quântico é, a princípio, uma função arbitrária da coordenada z , regime descrito por meio da introdução de campos elétricos externos de intensidade experimentalmente controlável. A presença destes campos pode gerar assimetrias na estrutura do poço quântico, modificando portanto as autofunções que descrevem um elétron confinado nesta estrutura. A figura 4.4 mostra alguns casos típicos do perfil do potencial $\nu_0(z)$ que confina o gás de elétrons bidimensional. Note que em alguns casos além da altura do poço não necessariamente ser constante, pode haver ainda uma quantidade arbitrária de barreiras internas ao potencial. Resumindo, a liberdade na escolha do perfil deste potencial dita a generalidade da descrição do modelo de duas subbandas na figura da matriz $\widetilde{H}$.

Figura 4.4 – Alguns perfis típicos do potencial estrutural $\nu_0(z)$ responsável pelo confinamento do gás bidimensional de elétrons. A geometria mais simples é aquela dada pelo poço quadrado 4.4(a), onde o caráter simétrico do potencial atribui paridades específicas às autofunções de H_d . A generalização mais óbvia deste caso é dada pelo poço retangular 4.4(b), o qual pode conter inúmeras barreiras internas 4.4(c). A figura 4.4(d) representa um poço quântico onde o potencial confinante varia assimetricamente como uma função linear na coordenada z .

Então, se nos limitarmos a análise de potenciais $\nu_0(z)$ simétricos, podemos resolver facilmente o problema com o qual nos deparamos ao final da última seção. Deixando mais claro, uma vez que o potencial é simétrico as funções de onda que descrevem o elétron no poço quântico também possuem paridade definida. Em particular, os autoestados $u_0(z)$ e $u_1(z)$ relativos aos dois primeiros níveis de energia do poço são, respectivamente, funções pares e ímpares. Assim, segue que $u_0(z) = u_0(-z)$ e $u_1(z) = -u_1(-z)$. A conjunção destes fatos nos permite concluir que o coeficiente β_{01} é identicamente nulo. Para entender isto em mais detalhes, seja a equação (4.26) onde definimos alternativamente este acoplamento. Dado o caso $m = 0$, $n = 1$ e tomando o eixo de crescimento do poço na direção z limitado ao intervalo de integração $[-z_0, +z_0]$, temos

$$\beta_{01} = -\frac{m_{\perp}}{M_{\perp}} \int_{-z_0}^{+z_0} u_0(z) V_0(z) u_1(z) dz. \quad (4.60)$$

Como a simetria intrínseca a $\nu_0(z)$ se estende ao potencial $V_0(z)$, ou seja, $V_0(z) = V_0(-z)$, através da mudança de variável $z \rightarrow -z$ a paridade de cada autofunção permite escrever

$$\beta_{01} = +\frac{m_{\perp}}{M_{\perp}} \int_{+z_0}^{-z_0} u_0(-z) V_0(-z) u_1(-z) dz = +\frac{m_{\perp}}{M_{\perp}} \int_{-z_0}^{+z_0} u_0(z) V_0(z) u_1(z) dz = -\beta_{01}, \quad (4.61)$$

demonstrando seguramente que $\beta_{01} = 0$. É interessante destacar que a simetria do potencial estrutural não interfere nos demais acoplamentos. De modo especial, o acoplamento dependente de spin intersubbanda $|\eta_{01}|$ introduzido em (4.29) é não-nulo mesmo em se tratando de poços simétricos.

A partir deste resultado trataremos apenas o caso em que o gás de elétrons bidimensional está confinado em poços quânticos simétricos. Neste sentido, refletindo a condição $\beta_{01} = 0$ na representação matricial de $\widetilde{H}$, temos

$$\widetilde{H} = \begin{bmatrix} \mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} & -\beta_{00} - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2M_{\parallel}} & i|\eta_{01}|k_{\parallel} & 0 \\ -\beta_{00} - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2M_{\parallel}} & \mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} & 0 & -i|\eta_{01}|k_{\parallel} \\ -i|\eta_{01}|k_{\parallel} & 0 & \mathcal{E}_1 + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} & -\beta_{11} - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2M_{\parallel}} \\ 0 & i|\eta_{01}|k_{\parallel} & -\beta_{11} - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2M_{\parallel}} & \mathcal{E}_1 + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} \end{bmatrix}. \quad (4.62)$$

Agora o polinômio característico fruto da equação secular em (4.58) é completamente

fatorável. Assim, o espectro do hamiltoniano $\widetilde{H}$ é formado por um conjunto de quatro autovalores convenientemente generalizados na expressão

$$E_{\lambda_1, \lambda_2}(k_{||}) = \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_{||}} + \epsilon_+ - \lambda_1 \beta_- + \lambda_2 \sqrt{|\eta_{01}|^2 k_{||}^2 + \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} + \beta_+ - \lambda_1 \epsilon_- \right)^2}, \quad (4.63)$$

onde os índices $\lambda_1 = \mp$ e $\lambda_2 = \pm$ estão associados à multiplicidade das energias frente a degenerescência por spin e do número de subbandas no poço, não necessariamente nessa ordem. É perfeitamente possível atribuir a devida interpretação física a estes índices, bastando para isso determinar como se relacionam com os graus de liberdade do sistema. O parâmetro λ_2 está ligado diretamente as subbandas, representando um tipo de pseudo-spin. Este fato pode ser facilmente verificado desligando o acoplamento dependente de spin na expressão para as energias, ou seja, tomando $|\eta_{01}| = 0$. Assim,

$$E_{\lambda_1, \lambda_2}(k_{||}) = \left(\frac{\hbar^2}{2m_{||}} + \lambda_1 \lambda_2 \frac{\hbar^2}{2M_{||}} \right) k_{||}^2 + (\mathcal{E}_0 + \lambda_1 \beta_{00}) \frac{(1 + \lambda_2)}{2} + (\mathcal{E}_1 + \lambda_1 \beta_{11}) \frac{(1 - \lambda_2)}{2}. \quad (4.64)$$

Podemos agora analisar a dependência de cada possível valor de λ_2 com quantidades associadas ao poço quântico. Em particular, enquanto $\lambda_2 = -1$ se associa ao primeiro estado excitado, o índice $\lambda_2 = +1$ está diretamente ligado ao estado fundamental. Como o índice λ_1 atribui um desdobramento a mais aos níveis de energia já rotulados por uma dada escolha de λ_2 , este pode ser entendido como um número quântico de spin. Designaremos então o número $\lambda_1 = +$ para o estado spin *up* enquanto $\lambda_1 = -$ passa a definir o estado spin *down*.

Do ponto de vista experimental, ou seja, daquilo que realmente é possível extrair informações físicas relevantes, tão interessante quanto conhecer a relação de dispersão do modelo é determinar o *splitting* nas energias. Como a presença dos números quânticos λ_1 e λ_2 introduz multiplicidades no espectro, podemos calcular a separação nas energias para cada tipo de degenerescência. Começando pelo *splitting* devido ao grau de liberdade de spin,

$$\Delta E_{\lambda_2}(k_{||}) = E_{-, \lambda_2}(k_{||}) - E_{+, \lambda_2}(k_{||}) = 2\beta_- + \lambda_2 [\Omega_-(\eta_{01}) - \Omega_+(\eta_{01})], \quad (4.65)$$

onde dada uma escolha do número quântico λ_1 o termo Ω_{λ_1} é uma função do acoplamento

dependente de spin $|\eta_{01}|$ e do quadrado da componente $k_{||}$ relativa a projeção do vetor de onda no plano,

$$\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01}) = \sqrt{|\eta_{01}|^2 k_{||}^2 + \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} + \beta_+ - \lambda_1 \epsilon_- \right)^2} . \quad (4.66)$$

Em particular, no ponto Γ da cela unitária onde $k_{||} = 0$, temos

$$\Delta E_{\lambda_2}(0) = 2(\beta_- + \lambda_2 \epsilon_-) . \quad (4.67)$$

Talvez o leitor não se recorde, mas o parâmetro β_- depende diretamente do parâmetro de Kane P_2 por meio da massa efetiva $M_{\perp}$. Isto pode ser verificado voltando à equação (4.26). Tendo informações experimentais acerca deste *spin-splitting*, ao juntar as equações (4.54), (4.24) e (3.38) conseguimos escrever uma relação que permite calcular o parâmetro de Kane P_2 ,

$$P_2 = \left\{ 3E_g \left(1 + \frac{E_g}{\Delta_c} \right) \left[\frac{\Delta E_{\lambda_2}(0) - \lambda_2(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_0)}{\langle u_1 | k_z^2 | u_1 \rangle - \langle u_0 | k_z^2 | u_0 \rangle} \right] \right\}^{1/2} . \quad (4.68)$$

Analogamente, o *splitting* devido a multiplicidade nas subbandas é calculado sem maiores problemas,

$$\Delta E_{\lambda_1}(k_{||}) = E_{\lambda_1,+}(k_{||}) - E_{\lambda_2,-}(k_{||}) = 2\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01}) . \quad (4.69)$$

Particularizando esta expressão para o caso em que $k_{||} = 0$, a separação nas energias é proporcional ao número quântico de spin λ_1 , a saber,

$$\Delta E_{\lambda_1}(0) = 2(\beta_+ - \lambda_1 \epsilon_-) . \quad (4.70)$$

Para concluir o estudo desta seção, resta calcular ainda os autovetores da matriz que representa a projeção de $\widetilde{H}$ na base de estados com duas subbandas do poço simétrico. Já sabemos que as energias possuem dependências muito sutis em relação aos números quânticos λ_1 e λ_2 . Uma vez que o espectro de $\widetilde{H}$ não é degenerado, obteremos um conjunto de quatro autovetores distintos, facilmente determinados, bastando para isso voltar à equação de autovalor do problema. Após uma análise cuidadosa da estrutura de cada um, é possível escrever uma expressão geral em termos dos índices λ_1 e λ_2 que compreenda todos os quatro autovetores. Assim, definindo o ket $|k_{||}, \lambda_1, \lambda_2\rangle$ como o espinor

normalizado que generaliza os quatro vetores de estado, temos

$$|k_{||}, \lambda_1, \lambda_2\rangle = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{\lambda_2 \Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}} \left\{ \frac{i\lambda_1 \lambda_2 |\eta_{01}| k_{||}}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01}) + \lambda_2 \Omega_{\lambda_1}(0)} |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \lambda_1 |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \right. \\ \left. - \frac{i\lambda_2 |\eta_{01}| k_{||}}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01}) + \lambda_2 \Omega_{\lambda_1}(0)} |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \right\}, \quad (4.71)$$

onde a função $\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})$ é dada na equação (4.66) e contém uma das dependências de cada estado com a componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano. Note que cada autoestado possui contribuições puramente imaginárias em duas de suas componentes. Desde que $\lambda_2 \neq -1$, se desligarmos o acoplamento dependente de spin intersubbanda $|\eta_{01}|$ retiramos toda a dependência imaginária dos autovetores. Muito embora esta expressão não apresente grande complexidade do ponto de vista algébrico, existe uma outra maneira de reescrevê-la. Após algumas simplificações que reservaremos ao apêndice D, o vetor de estado em (4.71) é dado por

$$|k_{||}, \lambda_1, \lambda_2\rangle = \frac{1}{2} \{ i\lambda_2 a_{\lambda_1 \lambda_2} |\uparrow\rangle \otimes (\lambda_1 |\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) + b_{\lambda_1 \lambda_2} |\downarrow\rangle \otimes (\lambda_1 |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \}, \quad (4.72)$$

onde os coeficientes $a_{\lambda_1 \lambda_2}$ e $b_{\lambda_1 \lambda_2}$ são definidos como

$$a_{\lambda_1 \lambda_2} = \sqrt{1 - \lambda_2 \frac{\Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}}, \quad b_{\lambda_1 \lambda_2} = \sqrt{1 + \lambda_2 \frac{\Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}}. \quad (4.73)$$

Na análise da relação de dispersão de $\widetilde{H}$ em (4.62) concluímos que $\lambda_2 = +$ e $\lambda_2 = -$ se referem aos estados fundamental e excitado, respectivamente, do poço quântico simétrico. Já que os estados no lado esquerdo do produto tensorial em (4.72) se associam ao espaço de subbandas, ou seja, pseudo-spins, é natural portanto estabelecer as equivalências $|\uparrow\rangle \equiv |u_0\rangle$ e $|\downarrow\rangle \equiv |u_1\rangle$. Assim, temos

$$|k_{||}, \lambda_1, \lambda_2\rangle = \frac{1}{2} \{ i\lambda_2 a_{\lambda_1 \lambda_2} |u_0\rangle \otimes (\lambda_1 |\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) + b_{\lambda_1 \lambda_2} |u_1\rangle \otimes (\lambda_1 |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \}. \quad (4.74)$$

Além de ser bem mais intuitiva que a equação (4.72), a expressão (4.74) será muito útil no tratamento das transições ópticas que faremos no capítulo 6.

Podemos ainda pensar que o hamiltoniano $\widetilde{H}$ é diagonal sob a ação de uma transformação de similaridade caracterizada pela matriz unitária G cujas colunas são formadas

pelos vetores de estado $|k_{||}, \lambda_1, \lambda_2\rangle$, ou seja,

$$G^{-1}\widetilde{H}G = \text{diag}(E_{+,-}; E_{+,+}; E_{-,+}; E_{-,-}) . \quad (4.75)$$

Recorrendo ao resultado indicado em (4.72) e tendo em mente os vínculos entre os coeficientes a_{λ_1, λ_2} e b_{λ_1, λ_2} dados no apêndice D, a matriz G é então escrita como

$$G = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -ia_{+,-} & +ia_{+,+} & -ia_{-,+} & +ia_{-,-} \\ +ia_{+,-} & -ia_{+,+} & -ia_{-,+} & +ia_{-,-} \\ +a_{+,+} & +a_{+,-} & -a_{-,-} & -a_{-,+} \\ +a_{+,+} & +a_{+,-} & +a_{-,-} & +a_{-,+} \end{bmatrix} . \quad (4.76)$$

4.3 Monoestruturas

Nos dedicaremos nesta seção ao estudo da estrutura eletrônica relativa a presença de um elétron na banda de condução do semicondutor na fase *bulk*. No capítulo anterior verificamos que tomando o potencial estrutural do poço quântico identicamente nulo todos os resultados obtidos para a heteroestrutura no *folding down* se aplicam imediatamente à monoestrutura semicondutora. Em particular, o hamiltoniano efetivo passa a assumir a forma

$$H = (\mathbf{a}_1 k_{||}^2 + \mathbf{a}_2 k_z^2) \mathbf{1}_{2 \times 2} + (\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2) \sigma_z - \mathbf{a}_5 k_z \Sigma + (\mathbf{a}_6 k_{||}^2 + \mathbf{a}_7 k_z^2) (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) , \quad (4.77)$$

onde as massas efetivas $\mathbf{a}_l$ podem ser encontradas nas equações (3.43), (3.49) e (3.50). Muito embora tenhamos nos restringido apenas a linearizações dos denominadores de energia em primeira ordem de aproximação na heteroestrutura, o leitor deve se recordar que esta expressão inclui correções em segunda ordem no inverso do gap de energia vindas do bloco não-diagonal 6×6 da matriz de Kane na figura das massas $\mathbf{a}_6$ e $\mathbf{a}_7$.

Ao contrário do que acontece na heteroestrutura semicondutora, aqui as componentes

do vetor de onda $\mathbf{k}$ representam apenas números e a componente espinorial ψ_0 relativa a banda de condução estará sujeita apenas a ação das matrizes de Pauli presentes no hamiltoniano H . Assim, nossa tarefa no estudo da estrutura eletrônica da monoestrutura se restringe a solução completa do problema de autovalor definido pela equação efetiva (4.77).

Prezando a coerência com o procedimento usado nas últimas seções ao determinar a relação de dispersão e os autoestados de H na heteroestrutura, vamos submeter o hamiltoniano efetivo à transformação unitária que diagonaliza o operador helicidade no plano. Esta forma de tratar o problema é bem razoável, pois estaremos livres para traçar eventuais paralelos entre ambos os resultados. Na seção 4.1 mostramos que o operador Σ é diagonal sob ação da transformação de similaridade caracterizada pela matriz Λ definida em (4.2). Esta transformação leva (4.77) a um novo hamiltoniano $\widetilde{H}$, a saber,

$$\widetilde{H} = (\mathbf{a}_1 k_{||}^2 + \mathbf{a}_2 k_z^2) \mathbb{1}_{2 \times 2} - (\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2) \sigma_x - \mathbf{a}_5 k_{||} k_z \sigma_z - (\mathbf{a}_6 k_{||}^2 + \mathbf{a}_7 k_z^2) k_{||} \sigma_y . \quad (4.78)$$

O leitor pode consultar no apêndice C a demonstração explícita da ação desta transformação numa matriz de elementos arbitrários. Em especial, como estamos interessados na matriz σ_z , no operador helicidade Σ e ainda no acoplamento usual de Rashba, dispomos das seguintes expressões

$$\Lambda^{-1} \sigma_z \Lambda = -\sigma_x , \quad \Lambda^{-1} (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \Lambda = -k_{||} \sigma_y , \quad \Lambda^{-1} \Sigma \Lambda = \sigma_z . \quad (4.79)$$

Desprezando toda a dependência em segunda ordem nos denominadores de energia representada na equação (4.78) pelas massas efetivas $\mathbf{a}_6$ e $\mathbf{a}_7$, este resultado concorda exatamente com o hamiltoniano efetivo em primeira ordem (4.8) se ignorarmos ainda o potencial estrutural do poço quântico e k_z for entendido como um número.

A partir deste momento não há muito mais o que fazer senão diagonalizar o hamiltoniano $\widetilde{H}$ tendo em vista sua representação matricial explícita,

$$\widetilde{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 k_{||}^2 + \mathbf{a}_2 k_z^2 - \mathbf{a}_5 k_{||} k_z & -\mathbf{a}_3 k_{||}^2 - \mathbf{a}_4 k_z^2 + i\mathbf{a}_6 k_{||}^3 + i\mathbf{a}_7 k_{||} k_z^2 \\ -\mathbf{a}_3 k_{||}^2 - \mathbf{a}_4 k_z^2 - i\mathbf{a}_6 k_{||}^3 - i\mathbf{a}_7 k_{||} k_z^2 & \mathbf{a}_1 k_{||}^2 + \mathbf{a}_2 k_z^2 + \mathbf{a}_5 k_{||} k_z \end{bmatrix} . \quad (4.80)$$

As duas energias podem ser convenientemente generalizadas na expressão

$$E_\mu(k_{||}, k_z) = \mathfrak{a}_1 k_{||}^2 + \mathfrak{a}_2 k_z^2 + \mu \sqrt{(\mathfrak{a}_3 k_{||}^2 + \mathfrak{a}_4 k_z^2)^2 + \mathfrak{a}_5^2 k_{||}^2 k_z^2 + (\mathfrak{a}_6 k_{||}^2 + \mathfrak{a}_7 k_z^2)^2 k_{||}^2} , \quad (4.81)$$

onde $\mu = \pm$ representa a multiplicidade da relação de dispersão frente a degenerescência introduzida pelo grau de liberdade de spin. Além da dependência predominantemente quadrática nas componentes do vetor de onda, a superfície de energia descreve um parabolóide de revolução no plano definido pelo par de coordenadas $(k_{||}, k_z)$ e possui um mínimo no ponto $\mathbf{k} = 0$. Do ponto de vista experimental, uma quantidade importante é dada pelo *splitting* nas energias. Diferentemente do que se observa no modelo de subbandas na descrição da heteroestrutura, aqui o *splitting* é devido exclusivamente a spin,

$$\Delta E(k_{||}, k_z) = E_+ - E_- = 2\sqrt{(\mathfrak{a}_3 k_{||}^2 + \mathfrak{a}_4 k_z^2)^2 + \mathfrak{a}_5^2 k_{||}^2 k_z^2 + (\mathfrak{a}_6 k_{||}^2 + \mathfrak{a}_7 k_z^2)^2 k_{||}^2} . \quad (4.82)$$

O *splitting* apresenta dependência em primeira e segunda ordem no inverso do gap de energia através das massas efetivas indicadas e é identicamente nulo para o caso em que $\mathbf{k} = 0$, ou seja,

$$\Delta E(0, 0) = 0 . \quad (4.83)$$

Esta característica é semelhante aquela observada na separação das energias em sistemas cúbicos como é o caso de materiais semicondutores com rede zincblende (43). Entretanto, podemos explorar um pouco mais o *splitting* tomando algumas escolhas para as componentes do vetor de onda não tão radicais como aquela em (4.83). Em especial, escolhendo $k_{||} = 0$ e deixando a componente k_z livre, a separação nas bandas de energia é diretamente proporcional ao quadrado do parâmetro de Kane P_2 , dependendo apenas do gap E_g e do *split-off* do campo cristalino Δ_c ,

$$\Delta E(0, k_z) = 2\mathfrak{a}_4 k_z^2 = \frac{2P_2^2}{3} \left(\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E_g + \Delta_c} \right) k_z^2 . \quad (4.84)$$

Na prática, se para cada valor de k_z conhecermos experimentalmente o *splitting* $\Delta E(0, k_z)$ associado, a equação anterior fornece uma maneira analítica de determinar o parâmetro de Kane P_2 , ou seja,

$$P_2 = \left[\frac{3E_g(E_g + \Delta_c)}{2\Delta_c k_z^2} \Delta E(0, k_z) \right]^{1/2} . \quad (4.85)$$

Muito embora este parâmetro represente uma quantidade fundamental na descrição do modelo de Kane em sistemas com simetria hexagonal, grande parte das referências o quantifica de maneira distinta (53, 54). Na maioria das vezes essa discrepância se origina nos métodos empregados em seu cálculo.

Uma vez que a relação de dispersão se abre em duas superfícies de energia devido a degenerescência por spin $\mu = \pm$, naturalmente os autoestados do hamiltoniano $\widetilde{H}$ seguem a mesma lógica e passam a ser classificados pelo número quântico μ . Após algum esforço algébrico o espinor da banda de condução devidamente normalizado pode ser generalizado na expressão

$$|\psi_\mu\rangle = \frac{-(\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2) + i(\mathbf{a}_6 k_{||}^2 + \mathbf{a}_7 k_z^2) k_{||}}{\sqrt{(\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2)^2 + (\mathbf{a}_5 k_{||} k_z + \mu\Gamma)^2 + (\mathbf{a}_6 k_{||}^2 + \mathbf{a}_7 k_z^2)^2 k_{||}^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{(\mathbf{a}_5 k_{||} k_z + \mu\Gamma)}{\sqrt{(\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2)^2 + (\mathbf{a}_5 k_{||} k_z + \mu\Gamma)^2 + (\mathbf{a}_6 k_{||}^2 + \mathbf{a}_7 k_z^2)^2 k_{||}^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.86)$$

onde Γ representa uma função das coordenadas $(k_{||}, k_z)$ do vetor de onda e das massas efetivas do modelo,

$$\Gamma(k_{||}, k_z) = \sqrt{(\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2)^2 + \mathbf{a}_5^2 k_{||}^2 k_z^2 + (\mathbf{a}_6 k_{||}^2 + \mathbf{a}_7 k_z^2)^2 k_{||}^2}. \quad (4.87)$$

É interessante notar que cada espinor $|\psi_\mu\rangle$ carrega as dependências em primeira e segunda ordem no inverso do gap vindas do processo de linearização dos denominadores de energia procedente do *folding down*. Curiosamente, as massas efetivas $\mathbf{a}_6$ e $\mathbf{a}_7$ relativas a correção em segunda ordem são responsáveis pela introdução de um fator imaginário nos autoestados de $\widetilde{H}$. Além disso, não levando em conta o fator de normalização do vetor de estado, esse termo é ainda proporcional a potências cúbicas nas componentes do vetor de onda em questão. Se porventura a correção em segunda ordem for desprezível ou ainda assim não for apreciável por algum motivo consistente, a parcela imaginária automaticamente desaparece.

Agora que resolvemos completamente o problema de autovalor proposto pelo hamiltoniano efetivo $\widetilde{H}$, vamos tentar reescrever cada espinor $|\psi_\mu\rangle$ numa forma mais simples. Nos próximos capítulos, em particular no capítulo 6 em que trataremos das transições ópticas

via absorção de um fóton no material semiconductor, os cálculos que desenvolveremos para a monoestrutura serão bem mais imediatos se o espinor $|\psi_\mu\rangle$ tiver uma representação algébrica ligeiramente mais econômica. Para todos os propósitos, podemos partir da seguinte identidade,

$$\left(\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2\right)^2 + (\mathbf{a}_5 k_{||} k_z + \mu\Gamma)^2 + \left(\mathbf{a}_6 k_{||}^2 + \mathbf{a}_7 k_z^2\right)^2 k_{||}^2 = 2\Gamma(\Gamma + \mu\mathbf{a}_5 k_{||} k_z) . \quad (4.88)$$

Substituindo este resultado na equação (4.86), o coeficiente que multiplica o estado spin *up* apresenta dois novos termos que podem ser imediatamente parametrizados em função de um ângulo Φ arbitrário através das relações trigonométricas

$$\sin \Phi = \frac{(\mathbf{a}_6 k_{||}^2 + \mathbf{a}_7 k_z^2)}{(\Gamma + \mu\mathbf{a}_5 k_{||} k_z)} k_{||} , \quad \cos \Phi = \frac{\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2}{(\Gamma + \mu\mathbf{a}_5 k_{||} k_z)} . \quad (4.89)$$

Este par de equações permite calcular o ângulo Φ independentemente da multiplicidade introduzida pelo número quântico de spin μ ,

$$\Phi = \tan^{-1} \left[\frac{(\mathbf{a}_6 k_{||}^2 + \mathbf{a}_7 k_z^2)}{\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2} k_{||} \right] . \quad (4.90)$$

Note que escolhendo $\mathbf{a}_6 = \mathbf{a}_7 = 0$, ou seja, desprezando todas as correções em segunda ordem no inverso do gap de energia, o ângulo Φ então assume apenas múltiplos inteiros de π . Em outras palavras, $\Phi = n\pi$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) simboliza a ausência da contribuição imaginária no espinor $|\psi_\mu\rangle$. Finalmente, reescrevendo a equação (4.86) em termos destes resultados, temos

$$|\psi_\mu\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \mu \frac{\mathbf{a}_5 k_{||} k_z}{\Gamma}} \left\{ \mu |\downarrow\rangle - e^{-i\Phi} |\uparrow\rangle \right\} . \quad (4.91)$$

Tendo em vista que a relação de dispersão em (4.81) depende apenas dos gaps E_g , Δ_c , Δ_{so} e das componentes do vetor de onda $\mathbf{k} = (k_{||}, k_z)$ que na monoestrutura são números, seria injusto encerrar este capítulo sem o menos dar alguns exemplos numéricos deste resultado. Em particular, tomaremos o InAs e o InP cristalizados na fase wurtzita para calcular numericamente esta relação de dispersão. A escolha destes semicondutores é baseada em dois aspectos distintos. Quanto ao primeiro, devemos ter em mente que formulamos o modelo de Kane na prescrição das simetrias Γ_7 , Γ_9 , Γ_7 e Γ_7 (ordenamento normal) ou Γ_7 , Γ_7 , Γ_9 e Γ_7 (ordenamento anômalo) para a banda de condução e as

três bandas de valência, respectivamente. Assim, é necessário escolher materiais que respeitem esta hierarquia de simetrias para cada banda de energia. O outro aspecto tem respaldo tecnológico uma vez que tanto o InAs quanto o InP têm larga aplicação no desenvolvimento de dispositivos optoeletrônicos (30).

A tabela 4.1 fornece os gaps ($E_g, \Delta_c, \Delta_{so}$) e o parâmetro de Kane P_1 para cada material fornecidos pelas referências (52,53). Através da relativa diferença no gap E_g destes semicondutores, esperamos traçar paralelos e pontuar discrepâncias sempre que possível nas energias da banda de condução de cada estrutura.

Tabela 4.1 – Parâmetros da estrutura de bandas dos semicondutores InAs e InP. Estes valores são tomados tendo como base as referências (52,53).

	E_g (eV)	Δ_c (eV)	Δ_{so} (eV)	P_1 (eV·nm)
InAs	0.481	0.195	0.379	0.905
InP	1.474	0.303	0.108	0.888

Muito embora não seja necessário, nos restringiremos aqui ao caso em que os parâmetros de Kane P_1 e P_2 são iguais em cada material, ou seja, $P_2 = 0.905$ eV·nm no InAs e $P_2 = 0.888$ eV·nm no InP. É importante ter em mente que para cada gráfico apresentado a seguir estaremos definindo um valor específico para o ângulo ϑ vindo da parametrização quase-cúbica. Na figura 4.5 apresentamos a relação de dispersão $E_{\pm}(k_{\parallel}, k_z)$ para a banda de condução do InAs 4.5(a) e InP 4.5(b) tomando o caso em que $k_z = 0$ e a componente do vetor de onda no plano varia no intervalo $0 \leq k_{\parallel} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$. Ademais, as curvas de energia são traçadas tomando o ângulo $\vartheta = 0^\circ$, ou seja, $\bar{P}_1 = P_1$ e $\tilde{P}_1 = 0$. Em cada gráfico, as curvas azuis se referem ao estado de spin *up* (+), enquanto as curvas em vermelho estão ligadas ao estado de spin *down* (−). Observe as intensidades das energias em cada material. No InAs 4.5(a) a interação dependente de spin no hamiltoniano efetivo abre a degenerescência da banda de valência à medida que $k_{\parallel}$ aumenta. Como no InP 4.5(b) o valor do gap E_g torna as intensidades das duas curvas de energia muito próximas, este mesmo *spin-splitting* é bem menor. Na figura 4.6 apresentamos a relação de dispersão $E_{\pm}(k_{\parallel}, k_z)$ para a banda de condução do InAs 4.6(a) e InP 4.6(b) tomando o caso em que a componente $k_{\parallel}$ do vetor de onda no plano é nula e k_z varia no intervalo $|k_z| \leq 0.45 \text{ nm}^{-1}$. Novamente, as curvas de energia são traçadas tomando o ângulo $\vartheta = 0^\circ$, ou seja, $\bar{P}_1 = P_1$

Figura 4.5 – Relação de dispersão $E_{\pm}(k_{\parallel}, k_z)$ para a banda de condução do InAs 4.5(a) e InP 4.5(b) tomando o caso em que $k_z = 0$ e a componente do vetor de onda no plano varia no intervalo $0 \leq k_{\parallel} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$. As curvas de energia são traçadas considerando o ângulo $\vartheta = 0^\circ$ na *parametrização quase-cúbica*, ou seja, $\bar{P}_1 = P_1$ e $\tilde{P}_1 = 0$. Além disso adotamos por simplicidade o caso em que os parâmetros de Kane iguais em cada material, ou seja, $P_1 = P_2$. Em cada gráfico, a curva em azul está associada ao estado spin *up*, enquanto a curva em vermelho se refere ao estado spin *down*.

e $\tilde{P}_1 = 0$. Em cada gráfico, as curvas azuis se referem ao estado de spin *up* (+), enquanto as curvas em vermelho estão ligadas ao estado de spin *down* (–). Comparado à figura 4.5, o *spin-splitting* nas energias do InAs 4.6(a) é bem maior neste caso. Mesmo tomando o InP na figura 4.6(b), a abertura nos níveis de energia devido a interação dependente de spin é ligeiramente mais evidente na direção de crescimento da coordenada k_z do vetor de onda. De modo geral, tomando a direção de crescimento de k_z as intensidades nas energias também são maiores para ambos os materiais que no caso observado na figura 4.5.

Figura 4.6 – Relação de dispersão $E_{\pm}(k_{\parallel}, k_z)$ para a banda de condução do InAs 4.6(a) e InP 4.6(b) tomando o caso em que a componente $k_{\parallel}$ do vetor de onda no plano é nula e $|k_z| \leq 0.45 \text{ nm}^{-1}$. As curvas de energia são traçadas considerando o ângulo $\vartheta = 0^\circ$ na *parametrização quase-cúbica*, ou seja, $\bar{P}_1 = P_1$ e $\tilde{P}_1 = 0$. Além disso adotamos por simplicidade o caso em que os parâmetros de Kane iguais em cada material, ou seja, $P_1 = P_2$. Em cada gráfico, a curva em azul está associada ao estado spin *up*, enquanto a curva em vermelho se refere ao estado spin *down*.

Uma vez que escolhemos o caso $\vartheta = 0$, desprezamos todos os efeitos de segunda ordem presentes na relação de dispersão vindos da interação spin-órbita de Rashba no hamiltoniano efetivo em (4.80). Nos próximos gráficos vamos tomar alguns valores não-nulos para este ângulo e comparar os resultados com o caso $\vartheta = 0$. Em todas as figuras seguintes estaremos interessados na variação das energias da banda de condução em função da componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano, dado $k_z = 0$.

A figura 4.7 mostra a relação de dispersão $E_{\pm}(k_{||}, k_z)$ para a banda de condução do InAs 4.7(a) e InP 4.7(b) tomando o caso em que $k_z = 0$ e a componente do vetor de onda no plano varia no intervalo $0 \leq k_{||} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$. Cada curva de energia é traçada considerando o ângulo $\vartheta = 30^\circ$ na parametrização quase-cúbica. Na figura 4.8 apresentamos a relação

Figura 4.7 – Relação de dispersão $E_{\pm}(k_{||}, k_z)$ para a banda de condução do InAs 4.7(a) e InP 4.7(b) tomando o caso em que $k_z = 0$ e a componente do vetor de onda no plano varia no intervalo $0 \leq k_{||} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$. As curvas de energia são traçadas considerando o ângulo $\vartheta = 30^\circ$ na parametrização quase-cúbica e tomando os parâmetros de Kane iguais em cada material, ou seja, $P_1 = P_2$. A curva em azul está associada ao estado spin *up*, enquanto a curva em vermelho se refere ao estado spin *down*.

de dispersão $E_{\pm}(k_{||}, k_z)$ para a banda de condução do InAs 4.8(a) e InP 4.8(b) tomando $k_z = 0$ e $0 \leq k_{||} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$. As curvas de energia são traçadas considerando o ângulo $\vartheta = 45^\circ$. Finalmente, a figura 4.9 mostra as energias $E_{\pm}(k_{||}, k_z)$ para a banda de condução do InAs 4.9(a) e InP 4.9(b) tomando $k_z = 0$ e $0 \leq k_{||} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$. As curvas de energia são traçadas considerando o ângulo $\vartheta = 60^\circ$. Comparando as figuras 4.7, 4.8 e 4.9 observa-se que as intensidades das energias da banda de condução aumentam em resposta ao acréscimo no ângulo ϑ . Note que este aumento nas intensidades das energias ainda é limitado superiormente pelo caso $\vartheta = 0$ mostrado na figura 4.5. Assim como nas figuras 4.5 e 4.6, o InAs também apresenta o *splitting* nas curvas de energia. Entretanto, muito

Figura 4.8 – Relação de dispersão $E_{\pm}(k_{\parallel}, k_z)$ para a banda de condução do InAs 4.8(a) e InP 4.8(b) tomando o caso em que $k_z = 0$ e a componente do vetor de onda no plano varia no intervalo $0 \leq k_{\parallel} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$. As curvas de energia são traçadas considerando o ângulo $\vartheta = 45^\circ$ na *parametrização quase-cúbica* e tomando os parâmetros de Kane iguais em cada material, ou seja, $P_1 = P_2$. A curva em azul está associada ao estado spin *up*, enquanto a curva em vermelho se refere ao estado spin *down*.

Figura 4.9 – Relação de dispersão $E_{\pm}(k_{\parallel}, k_z)$ para a banda de condução do InAs 4.9(a) e InP 4.9(b) tomando o caso em que $k_z = 0$ e a componente do vetor de onda no plano varia no intervalo $0 \leq k_{\parallel} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$. As curvas de energia são traçadas considerando o ângulo $\vartheta = 60^\circ$ na *parametrização quase-cúbica* e tomando os parâmetros de Kane iguais em cada material, ou seja, $P_1 = P_2$. A curva em azul está associada ao estado spin *up*, enquanto a curva em vermelho se refere ao estado spin *down*.

embora as energias no InP aumentem à medida que o ângulo ϑ varia, o *spin-splitting* não é visível nos gráficos. Um aspecto que até agora ignoramos se refere a escolha do parâmetro de Kane P_2 , aqui tomado igual ao parâmetro de Kane P_1 . Na verdade um aumento ou decréscimo neste parâmetro se reflete em cada relação de dispersão abrindo ou fechando a concavidade das parábolas. Em outras palavras, esta variação está ligada a intensidade das energias observadas.

No próximo capítulo vamos determinar a estrutura eletrônica completa da monoestrutura semicondutora através da diagonalização semi-analítica da matriz de Kane 8×8 . Desta forma, teremos condições de avaliar a consistência das aproximações que nos leva-

ram ao hamiltoniano efetivo $\widetilde{H}$ e, mais ainda, verificar sob quais intervalos das componentes do vetor de onda a relação de dispersão $E_\mu(k_\parallel, k_z)$ dada em (4.81) se aplica. Apenas adiantando ao leitor, a relação de dispersão da banda de condução obtida através da linearização nos denominadores de energia desenvolvida aqui concorda com a diagonalização analítica da matriz de Kane se as componentes do vetor de onda obedecem aos intervalos $0 \leq k_\parallel \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$ e $|k_z| \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$.

Capítulo 5

Diagonalização semi-analítica da matriz de Kane na fase *bulk*

Não seria muita presunção afirmar que a dificuldade algébrica central relacionada ao nosso modelo de oito bandas reside na solução do problema de autovalor descrito pelo hamiltoniano de Kane H . Mesmo na fase *bulk*, caso mais simples que a heteroestrutura, já não há esperanças de encontrar soluções analíticas do problema graças a presença de um polinômio característico de oitava ordem.

Muito embora não saibamos como fatorar o polinômio característico da matriz de Kane 8×8 para a fase *bulk*, nossa proposta neste capítulo consiste em fornecer uma expressão fechada para cada um de seus coeficientes manipulando analiticamente a equação secular associada. Ao final, teremos em mãos uma equação algébrica homogênea cujo conjunto de soluções descreve a relação de dispersão de H e pode ser prontamente calculado via simulações numéricas adequadas. Ademais, este resultado fornecerá bases suficientes para analisar a precisão das linearizações nos denominadores de energia adotadas na seção (4.3), verificando ainda para qual intervalo em torno de $k = 0$ o uso do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ é consistente.

5.1 A diagonalização do hamiltoniano de Kane

No capítulo 3 encontramos uma forma um pouco mais geral de escrever o hamiltoniano de Kane 8×8 que aquela normalmente reportada na maior parte das referências correntes, seja para sistemas cúbicos (42) ou hexagonais (38). Nela apresentamos o hamiltoniano de Kane em termos de blocos matriciais que evidenciam as respectivas dependências com os acoplamentos vindos das bandas de condução e valência, ou seja,

$$H = \begin{bmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_v \end{bmatrix}, \quad (5.1)$$

onde os blocos matriciais H_c , H_{cv} e H_v são dados nas equações (3.2), (3.3) e (3.7), respectivamente. Conforme mostrado em detalhe no capítulo 2, a grande generalidade deste resultado está no fato de considerarmos não-nulo o acoplamento entre as bandas de condução e *split-off* do campo cristalino em todo o cálculo, ou seja, $\Delta_4 \neq 0$. Se por um lado isto equivale ao acréscimo de mais um parâmetro ao modelo, por outro vinculamos os acoplamentos Δ_2 e Δ_3 em termos de Δ_4 através de relações trigonométricas caracterizadas pelo ângulo ϑ dadas em (2.92), procedimento este que define a chamada parametrização quase-cúbica.

A despeito desta (re)formulação do modelo de Kane, neste capítulo nos dedicaremos a um caso simples o suficiente do ponto de vista algébrico que não trará nenhum prejuízo ao entendimento da estrutura de bandas do semicondutor de rede wurtzita na fase *bulk*. Em particular, todos os cálculos desenvolvidos aqui consideram a parametrização cúbica, ou seja, o caso em que $\vartheta = 0$. Esta escolha leva imediatamente à condição $\Delta_4 = 0$ ou, em termos do parâmetro de Kane, $\tilde{P}_1 = 0$ e $\bar{P}_1 = P_1$. Há um motivo bem razoável para trabalhar nesta parametrização. Se $\vartheta = 0$, o bloco H_v de dimensão 6×6 é diagonal e sua inversa é facilmente computável. Adianto ao leitor que se H_v não é diagonal, o método algébrico que nos permitirá calcular o espectro de energias da matriz de Kane não será

nada útil. Feitos os devidos adendos, uma vez que $\tilde{P}_1 = 0$ e $\bar{P}_1 = P_1$, então

$$H_c = E_0 \mathbf{1}_{2 \times 2} , \quad H_{cv} = \begin{bmatrix} \mathbb{M}_1 & \mathbb{M}_2 & \mathbb{M}_3 \end{bmatrix} , \quad (5.2)$$

onde

$$\mathbb{M}_1 = +\frac{2P_1}{\sqrt{6}} \mathbf{M} \cdot \mathbf{k}_{||} + \frac{2P_2}{\sqrt{6}} M_z k_z , \quad \mathbb{M}_2 = +\frac{2P_1}{\sqrt{6}} \mathbf{N} \cdot \mathbf{k}_{||} + \frac{2P_2}{\sqrt{6}} N_z k_z , \quad \mathbb{M}_3 = -\frac{P_1}{\sqrt{3}} \sigma \cdot \mathbf{k}_{||} - \frac{P_2}{\sqrt{3}} \sigma_z k_z . \quad (5.3)$$

Da mesma forma como definimos no capítulo 3, aqui $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, $\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$ e $\mathbf{N} = (N_x, N_y, N_z)$. As matrizes M_s e N_s , $s \in \{x, y, z\}$, podem ser consultadas nas equações (3.5) e (3.6). Conforme mencionado, na parametrização cúbica o bloco matricial H_v associado a banda de condução assume um caráter estritamente diagonal,

$$H_v = \begin{bmatrix} E_1 \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & E_2 \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix} . \quad (5.4)$$

Apenas para relembrar, as energias na diagonal da matriz de Kane são dadas por

$$E_l = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_{gl} , \quad (5.5)$$

onde $l = (0, 1, 2, 3)$ e as energias E_{gl} dependem do gap E_g , do *split-off* do campo cristalino Δ_c e do acoplamento spin-órbita Δ_{so} , ou seja, parâmetros ligados diretamente a estrutura de bandas do material,

$$E_{g0} = 0 , \quad E_{g1} = E_g , \quad E_{g2} = E_g + \Delta_c , \quad E_{g3} = E_g + \Delta_c + \Delta_{so} . \quad (5.6)$$

Agora que pontuamos as características gerais do hamiltoniano de Kane, estamos prontos para determinar a estrutura eletrônica da monoestrutura semicondutora cristalizada na fase wurtzita. Para tanto, os autovalores de energia E do hamiltoniano H são obtidos através do conjunto de soluções da equação secular

$$\det (H - E \mathbf{1}_{8 \times 8}) = 0 . \quad (5.7)$$

O cálculo deste determinante é de longe uma das tarefas mais simples se não usarmos as ferramentas certas, em particular programas computacionais de manipulação algébrica.

Entretanto, mesmo recorrendo a estes recursos os resultados obtidos podem ser um tanto quanto intrincados uma vez que não são passíveis de simplificações imediatas. Existe uma solução para resolver este problema que dispensa o apelo computacional num primeiro momento. A idéia consiste em reduzir o determinante de uma matriz 8×8 ao produto de determinantes de matrizes 2×2 . Em outras palavras, uma vez que o bloco H_v é facilmente inversível, o determinante na equação (5.7) pode ser reescrito na forma (60)

$$\det(H - E\mathbf{1}_{8 \times 8}) = \det(H_v - E\mathbf{1}_{6 \times 6}) \det \left[H_c - E\mathbf{1}_{2 \times 2} - H_{cv}(H_v - E\mathbf{1}_{6 \times 6})^{-1} H_{cv}^\dagger \right] . \quad (5.8)$$

Grande parte das referências que se dedicam ao estudo da estrutura de bandas de materiais semicondutores de simetria cúbica (10, 44) utilizam um truque algébrico similar. A diferença básica entre os resultados está no fato de que $H_v H_{cv}^\dagger = (H_{cv} H_v)^t$ para o caso cúbico uma vez que $P_2 = P_1$, o que não acontece no sistema hexagonal. Como o bloco H_v é diagonal, o primeiro determinante à direita na equação (5.8) pode ser calculado facilmente,

$$\det(H_v - E\mathbf{1}_{6 \times 6}) = \Delta E_1^2 \Delta E_2^2 \Delta E_3^2 , \quad (5.9)$$

onde estamos definindo a diferença de energias

$$\Delta E_l = E_l - E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - (E_{gl} + E) , \quad (5.10)$$

com $l \in \{0, 1, 2, 3\}$. Para calcular o segundo determinante no produto dado em (5.8) devemos primeiro reescrever a soma de matrizes indicada fazendo algumas simplificações simples, a saber,

$$H_c - E\mathbf{1}_{2 \times 2} - H_{cv}(H_v - E\mathbf{1}_{6 \times 6})^{-1} H_{cv}^\dagger = \Delta E_0 \mathbf{1}_{2 \times 2} - \sum_{l=1}^3 \frac{1}{\Delta E_l} \mathbb{M}_l \mathbb{M}_l^\dagger . \quad (5.11)$$

O leitor atento perceberá que já encontramos o segundo termo à direita desta equação em outra ocasião, particularmente no desenvolvimento do *folding down* no capítulo 3. De fato, o paralelo entre este método e o *folding down* está na perspectiva de resolver o problema de autovalor reduzindo a dimensão das matrizes envolvidas. Os produtos matriciais $\mathbb{M}_l \mathbb{M}_l^\dagger$ são bem simples e o leitor pode novamente verificá-los no apêndice B.

Assim, escrevendo explicitamente cada uma das matrizes vindas destes produtos, temos

$$H_c - E\mathbf{1}_{2 \times 2} - H_{cv}(H_v - E\mathbf{1}_{6 \times 6})^{-1}H_{cv}^\dagger = \Delta E_0\mathbf{1}_{2 \times 2} + \frac{P_1 P_2}{3} \left(\frac{1}{\Delta E_1} - \frac{1}{\Delta E_2} \right) (k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) +$$

$$- \frac{1}{3} \left(\frac{1}{\Delta E_1} + \frac{1}{\Delta E_2} + \frac{1}{\Delta E_3} \right) (P_1 k_{||}^2 + P_2 k_z^2) \mathbf{1}_{2 \times 2} - \frac{1}{6} \left(\frac{1}{\Delta E_1} - \frac{1}{\Delta E_2} \right) (P_1 k_{||}^2 + 2P_2 k_z^2) \sigma_z . \quad (5.12)$$

Através desta expressão encontraremos o polinômio característico cujo conjunto de soluções representa a estrutura de bandas do material semiconductor de rede wurtzita na fase *bulk* para um dado ponto $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ no espaço recíproco. Convém ressaltar que este resultado é exato, livre de qualquer aproximação. Uma vez que transferimos todo o problema para o cálculo do determinante de uma matriz de ordem 2×2 ,

$$\det [H_c - E\mathbf{1}_{2 \times 2} - H_{cv}(H_v - E\mathbf{1}_{6 \times 6})^{-1}H_{cv}^\dagger] =$$

$$= \Delta E_0^2 - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{\Delta E_1} + \frac{1}{\Delta E_2} + \frac{1}{\Delta E_3} \right) (P_1^2 k_{||}^2 + P_2 k_z^2) \Delta E_1 +$$

$$+ \frac{1}{9} \left(\frac{4}{\Delta E_1 \Delta E_2} + \frac{2}{\Delta E_1 \Delta E_3} + \frac{2}{\Delta E_2 \Delta E_3} + \frac{1}{\Delta E_3^2} \right) (2P_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2) P_2^2 k_z^2 +$$

$$+ \frac{1}{9} \left(\frac{3}{4\Delta E_1^2} + \frac{3}{4\Delta E_2^2} + \frac{1}{\Delta E_3^2} + \frac{5}{2\Delta E_1 \Delta E_2} + \frac{2}{\Delta E_1 \Delta E_3} + \frac{2}{\Delta E_2 \Delta E_3} \right) P_1^4 k_{||}^4 . \quad (5.13)$$

Para determinar a forma geral da equação secular associada ao hamiltoniano de Kane devemos portanto substituir (5.9) e (5.13) na equação (5.8). Após algumas simplificações triviais, encontramos a seguinte expressão para o polinômio característico da matriz de Kane

$$4 [\Delta E_1^2 \Delta E_2^2 + 2\Delta E_1 \Delta E_2 \Delta E_3 (\Delta E_1 + \Delta E_2)] (P_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2)^2 +$$

$$+ 4 (P_1^4 k_{||}^4 + 6P_1^2 P_2^2 k_{||}^2 k_z^2 + 4P_2^4 k_z^4) \Delta E_1 \Delta E_2 \Delta E_3^2 + 36\Delta E_0^2 \Delta E_1^2 \Delta E_2^2 \Delta E_3^2 +$$

$$- 24\Delta E_0 \Delta E_1 \Delta E_2 \Delta E_3 (\Delta E_1 \Delta E_2 + \Delta E_1 \Delta E_3 + \Delta E_2 \Delta E_3) (P_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2) +$$

$$+ 3(\Delta E_1 + \Delta E_2)^2 \Delta E_3^2 P_1^4 k_{||}^4 = 0 . \quad (5.14)$$

Como as diferenças de energia ΔE_l guardam a dependência na variável E , o passo mais natural consiste em desenvolver todos os produtos na equação (5.14) e encontrar um polinômio de grau 8 cujo conjunto de soluções representa a relação de dispersão do semiconductor. Entretanto, além de depender da variável E , as diferenças ΔE_l são ainda

funções do módulo k do vetor de onda e de parâmetros ligados a estrutura de bandas do semicondutor conforme pode ser verificado na equação (5.10). Tendo isto em mente, não é muito útil expandir todos os termos nos produtos em (5.14) devido ao tamanho das expressões resultantes. Neste sentido, mesmo ao escrever o polinômio característico da matriz de Kane continuaremos a usar as energias E_0 , E_1 , E_2 e E_3 lembrando que dependem do módulo k do vetor de onda.

Expandir os produtos na equação (5.14) requer um pouco de atenção e paciência, mesmo utilizando ferramentas computacionais algébricas. É importante lembrar que teremos um polinômio de grau 8 na variável E que aparentemente não possui fatoração trivial. Seus coeficientes são funções do módulo k do vetor de onda, do gap E_g , do *split-off* do campo cristalino Δ_c e do acoplamento spin-órbita Δ_{so} na figura das energias E_l , onde $l = (0, 1, 2, 3)$. Assim,

$$E^8 + \zeta_7 E^7 + \zeta_6 E^6 + \zeta_5 E^5 + \zeta_4 E^4 + \zeta_3 E^3 + \zeta_2 E^2 + \zeta_1 E + \zeta_0 = 0 , \quad (5.15)$$

onde ζ_j , $j = (1, 2, \dots, 8)$, são os coeficientes do polinômio característico. O leitor perceberá que a dependência destes coeficientes em k é mediada pela componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano e pela componente k_z . De todos os coeficientes, o mais simples é aquele associado a potência de ordem 7 na energia E já que pode ser escrito em termos do traço do hamiltoniano de Kane 8×8 ,

$$\zeta_7 = -2(E_0 + E_1 + E_2 + E_3) = -\text{Tr}(H) . \quad (5.16)$$

Os demais coeficientes apresentam dependências mais complicadas, mas em geral sempre dependem de ζ_7 . Muito embora as expressões não tenham um significado matemático nítido, o que interessa saber é que serão muito úteis na próxima seção quando as colocarmos em teste ao determinar a estrutura de bandas de um semicondutor em especial. Assim, seguem portanto

$$\begin{aligned} \zeta_6 = -2 \left(P_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2 \right) + 2 [E_0 E_1 + E_2 E_3 + (E_0 + E_1)(E_2 + E_3)] + \\ + (E_0 + E_1 + E_2 + E_3)^2 , \end{aligned} \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned}
\zeta_5 = & -\frac{2}{3} [2E_0 - 5(E_0 + E_1 + E_2 + E_3)] (P_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2) - 2E_2 E_3 (E_0 + E_1) + \\
& - 2(E_0 + E_1 + E_2 + E_3) [E_0 E_1 + E_2 E_3 + (E_0 + E_1)(E_2 + E_3)] + \\
& - 2E_0 E_1 (E_2 + E_3) , \quad (5.18)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\zeta_4 = & 2[E_0 E_1 (E_2 + E_3) + E_2 E_3 (E_0 + E_1)] (E_0 + E_1 + E_2 + E_3) + 2E_0 E_1 E_2 E_3 + \\
& + [E_0 E_1 + E_2 E_3 + (E_0 + E_1)(E_2 + E_3)]^2 + (P_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2)^2 + \\
& - \frac{2}{3} \left\{ 2(E_0 + E_1 + E_2 + E_3)^2 + 8[E_0 E_1 + E_2 E_3 + (E_0 + E_1)(E_2 + E_3)] + \right. \\
& \left. - E_0 [3(E_0 + E_1 + E_2 + E_3) - E_0] \right\} (P_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2) , \quad (5.19)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\zeta_3 = & -2[E_0 E_1 + E_2 E_3 + (E_0 + E_1)(E_2 + E_3)] [E_0 E_1 (E_2 + E_3) + E_2 E_3 (E_0 + E_1)] + \\
& - 2E_0 E_1 E_2 E_3 (E_0 + E_1 + E_2 + E_3) - \frac{4}{3} (E_1 + E_2 + E_3) (P_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2)^2 + \\
& + 2 \left\{ [E_0 E_1 + E_2 E_3 + (E_0 + E_1)(E_2 + E_3)] (E_1 + E_2 + E_3) + [E_0 E_1 (E_2 + E_3) + \right. \\
& \left. + E_2 E_3 (E_0 + E_1)] + \frac{1}{3} E_0 [E_2 E_3 + E_1 (E_2 + E_3) - (E_1 + E_2 + E_3)^2] \right\} (P_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2) , \quad (5.20)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\zeta_2 = & -\frac{1}{6} \left\{ 6(E_1 + E_2 + E_3) [E_0 E_1 (E_2 + E_3) + E_2 E_3 (E_0 + E_1)] + 2E_1^2 (E_2^2 + E_3^2) + \right. \\
& + 2E_1 E_2 E_3 (E_0 + E_1 + E_2 + E_3) + 2E_2 E_3 (2E_0 E_1 + E_2 E_3) \left. \right\} (P_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2) + \\
& + \frac{1}{3} [(E_1 + E_2 + E_3)^2 + 2E_1 (E_2 + E_3) + E_2 (E_1 + 2E_3)] (P_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2)^2 + \\
& + \frac{1}{9} [E_3^2 + 2E_3 (E_1 + E_2) + E_1 E_2] (P_1^4 k_{||}^4 + P_2^4 k_z^4) + \frac{1}{12} (E_1 - E_2)^2 P_1^4 k_{||}^4 + \\
& + \frac{2}{9} [(E_1 + E_3)(E_2 + E_3) + E_3 (E_1 + E_2)] P_1^2 P_2^2 k_{||}^2 k_z^2 + \\
& + 2E_0 E_1 E_2 E_3 [E_0 E_1 + E_2 E_3 + (E_0 + E_1)(E_2 + E_3)] + \\
& + [E_0 E_1 (E_2 + E_3) + E_2 E_3 (E_0 + E_1)]^2 , \quad (5.21)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\zeta_1 = & \frac{2}{3} \left\{ E_0 E_1^2 (E_2 + E_3)^2 + E_0 E_2 E_3 [E_2 E_3 + 2E_1 (E_2 + E_3)] + \right. \\
& + E_1 E_2 E_3 [E_0 E_1 + E_2 E_3 + (E_0 + E_1) (E_2 + E_3) + E_0 (E_1 + E_2 + E_3)] \left. \right\} (P_1^2 k_{\parallel}^2 + P_2^2 k_z^2) + \\
& - \frac{2}{9} [E_3 (E_1^2 + E_2^2) + 2(E_1 + E_2) (E_3^2 + E_1 E_2)] (P_1^4 k_{\parallel}^4 + P_2^4 k_z^4) + \\
& - \frac{4}{9} \left\{ 2E_1 E_2 (E_1 + E_2) + E_3 [(E_1^2 + E_2^2) + 2E_3 (E_1 + E_2)] \right\} P_1^2 P_2^2 k_{\parallel}^2 k_z^2 + \\
& - \frac{1}{6} E_3 (E_1 - E_2)^2 P_1^4 k_{\parallel}^4 - 2E_0 E_1 E_2 E_3 [E_0 E_1 (E_2 + E_3) + E_2 E_3 (E_0 + E_1)] + \\
& - \frac{16}{9} E_1 E_2 E_3 (P_1^2 k_{\parallel}^2 + P_2^2 k_z^2)^2, \quad (5.22)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\zeta_0 = & -\frac{2}{3} E_0 E_1 E_2 E_3 [E_1 E_2 + E_3 (E_1 + E_2)] (P_1^2 k_{\parallel}^2 + P_2^2 k_z^2) + \frac{1}{12} E_3^2 (E_1 - E_2)^2 P_1^4 k_{\parallel}^4 + \\
& + \frac{1}{9} E_1 E_2 (E_1 + 2E_3) (E_2 + 2E_3) (P_1^2 k_{\parallel}^2 + P_2^2 k_z^2)^2 + E_0^2 E_1^2 E_2^2 E_3^2. \quad (5.23)
\end{aligned}$$

Uma vez que cada coeficiente listado depende do vetor de onda, para cada valor de k a equação algébrica dada em (5.15) fornece como solução um conjunto de oito energias. Assim, varrendo um dado número de vetores de onda no espaço recíproco temos informações suficientes para construir a estrutura de bandas do material semiconductor. Entretanto, se não tivermos condições de analisar todo o espaço recíproco, a prescrição do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ garante que pelo menos em torno do ponto Γ onde $k = 0$ no centro da cela unitária este procedimento deve valer. Na próxima seção tomaremos um semiconductor para exemplificar o cálculo da estrutura de bandas via solução direta do polinômio característico da matriz de Kane. Ao final, faremos uma comparação entre estes resultados e a relação de dispersão obtida no capítulo 4 para a banda de condução da monoestrutura semicondutora. O intuito neste paralelo será verificar para quais intervalos de k a linearização nos denominadores de energia é devidamente consistente.

5.2 A estrutura de bandas do InAs

De nada adianta encontrar uma forma fechada para os coeficientes ζ_j se não é possível fazer qualquer previsão para o espectro de energias da monoestrutura semicondutora. De fato, qualquer esperança de encontrar os autovalores de energia é perdida quando nos deparamos com um polinômio característico de grau oito completo. O nível de complicação dos coeficientes é tamanho que chega ser difícil crer na existência de qualquer tipo de fatoração para o polinômio. Este não é o caso de semicondutores com simetria cúbica na fase *bulk*, por exemplo, de rede zincblende (32, 33). O polinômio característico da matriz de Kane para estes materiais, embora um pouco complicado, ainda assim tem fatoração conhecida. Neste ponto, o melhor que podemos fazer é recorrer a um mínimo de simulações computacionais tomando um material semicondutor em particular.

Muito embora podemos tomar um semicondutor de estrutura hexagonal arbitrariamente, devemos ter em mente que formulamos o modelo de Kane na prescrição das simetrias Γ_7 , Γ_9 , Γ_7 e Γ_7 (ordenamento normal) ou Γ_7 , Γ_7 , Γ_9 e Γ_7 (ordenamento anômalo) para a banda de condução e as três bandas de valência, respectivamente. Assim, devemos escolher um material que respeite a referida hierarquia de simetrias para cada banda de energia. O antimoneto de índio cristalizado na fase wurtzita, InAs, obedece este pré-requisito e ainda tem grande apelo do ponto de vista comercial devido sua larga aplicação em dispositivos optoeletrônicos (30). Através da referência (52), podemos listar o gap E_g , o *split-off* do campo cristalino Δ_c , o acoplamento spin-órbita Δ_{so} e o parâmetro de Kane P_1 , a saber,

Tabela 5.1 – Parâmetros da estrutura de bandas do antimoneto de índio (InAs). Estes valores são tomados tendo como base a referência (52).

	E_g (eV)	Δ_c (eV)	Δ_{so} (eV)	P_1 (eV·nm)
InAs	0.481	0.195	0.379	0.905

Visto que o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ se aplica para valores de k em torno da origem do espaço recíproco, ou seja, o ponto Γ de maior simetria da cela unitária, vamos escolher os intervalos $0 \leq$

$k_z \leq 0.5 \text{ nm}^{-1}$ e $0 \leq k_{||} \leq 0.75 \text{ nm}^{-1}$ para calcular a estrutura de bandas do InAs via solução do polinômio característico dado em (5.15). Note que este resultado será bem mais completo que aquele obtido para a banda de condução da monoestrutura no capítulo 4 já que aqui teremos informações também acerca das bandas de valência do mesmo material. Substituindo os gaps dados na tabela 5.1 em cada coeficiente ζ_j , através de rotinas computacionais simples somos capazes de listar o conjunto de soluções do polinômio característico para cada valor das componentes $k_{||}$ e k_z do vetor de onda. Muito embora não seja uma condição necessária, tomaremos por simplicidade o caso em que os parâmetros de Kane são iguais, ou seja, $P_1 = P_2$. Na figura 5.1 mostramos o perfil da estrutura eletrônica do InAs sob diversos pontos de vista a partir da solução do polinômio característico da matriz de Kane. Nela estão representadas a banda de condução e as três bandas de valência degeneradas pelo grau de liberdade de spin, somando um total de oito superfícies de energia conforme previsto pelo modelo de Kane 8×8 . De maneira geral, as intensidades das energias na estrutura de bandas do InAs na fase *bulk* obtidas aqui estão de acordo com aquelas reportadas na referência (53). A diferença entre os métodos é que os autores utilizam cálculos *ab initio* para determinar a estrutura de bandas do material.

As duas superfícies de energia estritamente positivas na figura 5.1 definem a banda de condução. Como já esperado para um semicondutor de estrutura hexagonal, a interação spin-órbita abre a degenerescência da banda de valência em três superfícies de energia distintas. Aqui este número sobe para seis devido a multiplicidade dos estados spin *up* e *down*. As superfícies de energia em azul claro, conhecidas como bandas de buracos leves, definem o topo da banda de valência e também se abrem em dois ramos devido a presença de spin. A separação entre estas superfícies e aquelas que definem a banda de condução é dada pelo gap E_g . As superfícies de energia em tom azul escuro são conhecidas como bandas de buracos pesados. A abertura que separa estas energias daquelas no topo da banda de valência é dada pelo acoplamento Δ_c . Por fim, as energias em tom magenta representam a banda de valência de *split-off* do campo cristalino e sua separação com a banda de buracos pesados é mediada pelo acoplamento spin-órbita Δ_{so} . Uma vez que em semicondutores de simetria cúbica o acoplamento Δ_c é nulo, as bandas de buracos leves

Figura 5.1 – Estrutura de bandas do antimoneto de índio (InAs) calculada através da solução do polinômio da matriz de Kane dado em (5.15) tomando $0 \leq k_z \leq 0.5 \text{ nm}^{-1}$ e $0 \leq k_{||} \leq 0.75 \text{ nm}^{-1}$. A energia tem unidades de elétron-volt (eV) e as componentes do vetor de onda estão em unidades de nanômetros (nm). Os coeficientes ζ_j são funções dos gaps ($E_g, \Delta_c, \Delta_{so}$) e dos parâmetros de Kane P_1 e P_2 . Destes, apenas o parâmetro de Kane P_2 não está listado na tabela 5.1 e, por simplicidade, tomamos o caso em que $P_1 = P_2$. Além disso, como cada ζ_j depende ainda das componentes $k_{||}$ e k_z do vetor de onda, para cada valor destas coordenadas o polinômio característico retorna um conjunto de 8 soluções que juntas formam a estrutura de bandas do semiconductor.

e pesados se degeneram em torno de $k = 0$. O acoplamento spin-órbita nestes materiais é frequentemente rotulado como Δ_g .

Na figura 5.2 mostramos uma visão bidimensional da estrutura de bandas $E_{\pm}(k_{||}, k_z)$ do InAs. É possível perceber nitidamente a banda de condução (vermelho), o topo da banda de valência (azul), a banda de buracos pesados (amarelo) e a banda de valência de *split-off* do campo cristalino (preto) degeneradas por spin. Na figura 5.2(a) mostramos a relação de dispersão $E_{\pm}(k_{||}, 0)$ impondo $k_z = 0$ e também $0 \leq k_{||} \leq 0.6 \text{ nm}^{-1}$. Note que o spin *splitting* na banda de condução (vermelho) e no fundo da banda de valência (preto) é bem menor quando comparado a separação nas energias devido a spin no topo da banda de valência (azul e amarelo). Já a figura 5.2(b) exhibe as energias $E_{\pm}(0, k_z)$ para o caso em que a componente do vetor de onda no plano é nula, ou seja, $k_{||} = 0$, e ainda $|k_z| \leq 0.4 \text{ nm}^{-1}$. Analisando a figura 5.2(b) com mais atenção, é possível perceber *crossings* entre as superfícies de energia dentro da banda de valência, particularmente entre o topo da banda de valência (azul) e a banda de buracos pesados (amarelo). O *splitting* devido a spin no fundo da banda de valência é muito menor quando comparado a mesma separação nas energias das demais bandas. As curvas de energia são traçadas considerando a parametrização cúbica ($\vartheta = 0$) e tomando os parâmetros de Kane iguais no material, ou seja, $P_1 = P_2$.

Agora que conhecemos em detalhes a estrutura de bandas do InAs através da solução do polinômio característico da matriz de Kane, nada mais instrutivo que comparar este resultado àquele expresso na seção 4.3 para a relação de dispersão da banda de condução da monoestrutura obtida a partir do processo de linearização dos denominadores de energia outrora discutido. Com isso, tentaremos verificar sob quais intervalos das componentes do vetor de onda a aproximação da equação efetiva dada em (4.80) é realmente consistente. A idéia é bem simples: escolhendo a superfície de energia relativa ao estado spin *up* em cada caso, ou seja, aquela classificada pelo número quântico de spin $\mu = +$ na equação (4.81) e a banda de condução com maior energia na figura 5.1, através de algumas escolhas particulares para as componentes $k_{||}$ e k_z do vetor de onda $\mathbf{k} = (k_{||}, k_z)$ faremos comparações entre os valores numéricos das energias associada a estes pontos.

Figura 5.2 – Estrutura de bandas $E_{\pm}(k_{||}, k_z)$ do InAs cristalizado na fase wurtzita, onde é possível perceber a banda de condução (vermelho), o topo da banda de valência (azul), a banda de buracos pesados (amarelo) e a banda de valência de *split-off* do campo cristalino (preto) degeneradas por spin. Na figura 5.2(a) mostramos a relação de dispersão $E_{\pm}(k_{||}, 0)$ impondo $k_z = 0$ e também $0 \leq k_{||} \leq 0.6 \text{ nm}^{-1}$. Note que o spin *splitting* na banda de condução (vermelho) e no fundo da banda de valência (preto) é bem menor quando comparado a separação nas energias devido a spin no topo da banda de valência (azul e amarelo). Por outro lado, a figura 5.2(b) exibe as energias $E_{\pm}(0, k_z)$ para o caso em que a componente do vetor de onda no plano é nula, ou seja, $k_{||} = 0$, e ainda $|k_z| \leq 0.4 \text{ nm}^{-1}$. Um aspecto interessante deste resultado está no *crossing* entre o topo da banda de valência (azul) e a banda de buracos pesados (amarelo). O *splitting* devido a spin no fundo da banda de valência é muito menor quando comparado a mesma separação nas energias das demais bandas. As curvas de energia são traçadas considerando a parametrização cúbica ($\vartheta = 0$) e tomando os parâmetros de Kane iguais no material, ou seja, $P_1 = P_2$.

Para evitar qualquer tipo de confusão, daqui em diante usaremos $E_{num}(k_{||}, k_z)$ ao nos referir às energias vindas da solução numérica da equação secular da matriz de Kane e esta será nossa referência nas comparações. Analogamente, o termo $E_{sa}(k_{||}, k_z)$ sempre será usado para tratar das energias semi-analíticas da banda de condução do InAs vindas da aproximação em primeira ordem no inverso do gap de energia na equação efetiva estudada no capítulo 4. Sejam então os casos $\mathbf{k} = (k_{||}, 0)$ e $\mathbf{k} = (0, k_z)$ cujas respectivas energias são $E(k_{||}, 0)$ e $E(0, k_z)$. Na figura 5.3 comparamos as relações de dispersão $E_{\pm}(k_{||}, k_z)$ obtidas para a banda de condução do antimoneto de índio (InAs) através do processo de linearização dos denominadores de energia na equação efetiva (Semi-analítico) discutido no capítulo 4 àquelas vindas da solução numérica da equação secular da matriz de Kane 8×8 (Numérico), dada a parametrização cúbica onde $\vartheta = 0$ leva a $\bar{P}_1 = P_1$ e $\tilde{P}_1 = 0$. Nas

figuras 5.3(a) (caso spin *up*) e 5.3(b) (caso spin *down*), as curvas de energia são traçadas tomando o caso em que $k_z = 0$. Em contraste, nas figuras 5.3(c) (caso spin *up*) e 5.3(d) (caso spin *down*) escolhemos o caso $k_{||} = 0$ para construir as energias. Em todos os casos, os resultados concordam razoavelmente limitando as componentes do vetor de onda aos intervalos $0 \leq k_{||} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$ e $|k_z| \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$.

Figura 5.3 – Comparação entre as relações de dispersão $E_{\pm}(k_{||}, k_z)$ obtidas para a banda de condução do antimoneto de índio (InAs) através do processo de linearização dos denominadores de energia na equação efetiva (Semi-analítico) discutido no capítulo 4 e via solução numérica da equação secular da matriz de Kane 8×8 (Numérico), dada a parametrização cúbica onde $\vartheta = 0$. Nas figuras 5.3(a) (caso spin *up*) e 5.3(b) (caso spin *down*), as curvas de energia são traçadas tomando o caso em que $k_z = 0$. Em contraste, nas figuras 5.3(c) (caso spin *up*) e 5.3(d) (caso spin *down*) escolhemos o caso $k_{||} = 0$ para construir as energias. Em todos os casos, os resultados concordam razoavelmente limitando as componentes do vetor de onda aos intervalos $0 \leq k_{||} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$ e $|k_z| \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$.

Podemos analisar um pouco mais a fundo a margem de erro entre os resultados numérico e semi-analítico através das energias dadas nos gráficos da figura 5.3. Na tabela 5.2 comparamos estas energias para algumas escolhas de $k_{||}$ tomando $k_z = 0$. O que se observa é que estas energias concordam bem se mantermos até a segunda casa após a vírgula (no mínimo 90%). Tomando mais casas, temos um erro percentual que varia em torno de 1% à 20% quando $0 \leq k_{||} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$. Fora deste intervalo, as energias diferem

bastante entre si e o resultado para $E_{sa}(k_{||}, 0)$ reflete valores nada confiáveis em termos de precisão.

Tabela 5.2 – Comparação entre as energias $E_{num}(k_{||}, 0)$ e $E_{sa}(k_{||}, 0)$ para o caso em que a componente k_z do vetor de onda é nula e $0 \leq k_{||} \leq 0.75 \text{ nm}^{-1}$. Tanto as energias $E_{num}(k_{||}, 0)$, obtidas via solução da equação secular da matriz de Kane 8×8 para o InAs, quanto as energias $E_{sa}(k_{||}, 0)$, resultado da linearização no inverso do gap E_g , representam a banda de condução ligada ao estado de spin *up* esquematizada na figura 5.3(a).

$k_{ } (\text{nm}^{-1})$	$E_{num}(k_{ }, 0) (\text{eV})$	$E_{sa}(k_{ }, 0) (\text{eV})$
0.00	0.0000	0.0000
0.03	0.0024	0.0019
0.06	0.0096	0.0074
0.09	0.0212	0.0167
0.12	0.0368	0.0297
0.15	0.0558	0.0464
0.18	0.0779	0.0669
0.21	0.1024	0.0910
0.24	0.1290	0.1189
0.27	0.1575	0.1505
0.30	0.1874	0.1858
0.33	0.2186	0.2248
0.45	0.3532	0.4180
0.60	0.5360	0.7431
0.75	0.6899	1.1611

De modo similar, na tabela 5.3 comparamos as energias $E_{num}(0, k_z)$ e $E_{sa}(0, k_z)$ para algumas escolhas de k_z tomando $k_{||} = 0$. Novamente, as energias concordam razoavelmente até a segunda casa após a vírgula (no mínimo 90%) e apresentam um erro percentual que varia em torno de 1% à 27% se levarmos em conta mais casas na aproximação quando $|k_z| \leq 0.32 \text{ nm}^{-1}$. Trabalhando com a componente k_z além deste intervalo, as energias $E_{sa}(k_z, 0)$ apresentam valores que não são confiáveis em termos de precisão quando comparadas ao resultado numérico vindo da solução do polinômio característico da matriz de Kane.

Mas então o que se pode concluir quanto às energias $E_{sa}(k_{||}, k_z)$, em particular para a banda de condução? Bem, de imediato, para valores das componentes do vetor de onda além dos intervalos $0 \leq k_{||} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$ e $|k_z| \leq 0.32 \text{ nm}^{-1}$ qualquer previsão é altamente questionável frente ao resultado exato $E_{num}(k_{||}, k_z)$ vindo dos autovalores de energia da matriz de Kane. Este resultado reflete dois aspectos importantes. O primeiro

Tabela 5.3 – Comparação entre as energias $E_{num}(0, k_z)$ e $E_{sa}(0, k_z)$ para o caso em que a componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano é nula e $0 \leq k_z \leq 0.5 \text{ nm}^{-1}$. Tanto as energias $E_{num}(0, k_z)$, obtidas via solução da equação secular da matriz de Kane 8×8 para o InAs, quanto as energias $E_{sa}(0, k_z)$, resultado da linearização no inverso do gap E_g , representam a banda de condução ligada ao estado de spin *up* esquematizada na figura 5.3(c).

$k_z \text{ (nm}^{-1}\text{)}$	$E_{num}(0, k_z) \text{ (eV)}$	$E_{sa}(0, k_z) \text{ (eV)}$
0.00	0.0000	0.0000
0.02	0.0011	0.0009
0.04	0.0046	0.0034
0.06	0.0102	0.0077
0.08	0.0178	0.0137
0.10	0.0274	0.0215
0.12	0.0387	0.0309
0.14	0.0517	0.0421
0.16	0.0660	0.0549
0.18	0.0815	0.0695
0.20	0.0982	0.0858
0.22	0.1158	0.1039
0.24	0.1344	0.1236
0.26	0.1536	0.1451
0.28	0.1736	0.1682
0.30	0.1942	0.1931
0.32	0.2153	0.2197
0.36	0.2589	0.2781
0.40	0.3042	0.3434
0.50	0.4227	0.5365

diz respeito a essência do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, cuja prescrição garante a estrutura de bandas do semiconductor ao menos em torno do ponto Γ no centro da cela unitária onde $k = 0$. A segunda característica se refere a precisão e consistência do processo de linearização nos denominadores de energia, as quais são válidas num intervalo pequeno em torno de $k = 0$.

A partir dos próximos capítulos qualquer resultado que envolva valores numéricos para as componentes do vetor de onda levará em conta os intervalos $0 \leq k_{||} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$ e $|k_z| \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$. Como exemplo direto, destacamos as taxas de transição óptica $\tau(k_{||}, k_z)$ para o semiconductor na fase *bulk* calculadas na seção 6.5. Mesmo para resultados envolvendo a heteroestrutura semicondutora, como é o caso das transições ópticas em poços quânticos com uma e duas subbandas nas seções 6.4.1 e 6.4.2, respectivamente, qualquer simulação numérica obedecerá esta condição para as componentes do vetor de onda. Do ponto de vista experimental (61, 62), em geral $k \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$, o que justifica plenamente nossas aproximações.

Capítulo 6

Transições ópticas

A busca por dispositivos optoeletrônicos cada vez mais eficientes forma a base de grande parte da pesquisa científica atual envolvendo materiais semicondutores. Por sua vez, a física que descreve estes dispositivos se sustenta na interação entre elétrons e fótons, em particular na transição de elétrons de condução via a absorção ou emissão de partículas de luz. Em geral, a absorção de um fóton pode promover um elétron de um estado eletrônico para outro dentro da mesma banda, transição conhecida como *intrabanda*. Analogamente, a absorção de um fóton pode induzir, por exemplo, a transição de um elétron em um estado na banda de valência para outro na banda de condução, processo conhecido como transição *interbanda*.

Para descrever a interação entre um fóton e um elétron de condução seguiremos um caminho muito parecido com aquele adotado nos capítulos 2 e 3. A partir da introdução do campo eletromagnético na equação de Pauli, determinaremos um novo hamiltoniano de Kane via o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Ao final do capítulo obteremos um modelo efetivo que descreve a interação elétron-fóton em primeira ordem de aproximação no inverso do gap de energia tanto para uma heteroestrutura quanto para um material semicondutor na fase *bulk*.

6.1 A interação elétron-fóton e o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

A interação entre um fóton e um elétron de condução é mediada via introdução de campos eletromagnéticos externos ao sistema. A presença destes campos modifica singularmente a equação de Pauli, que descreve esta interação através do *acoplamento mínimo* (49, 63)

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} , \quad (6.1)$$

onde e representa a carga do elétron ($e < 0$) e $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ é o potencial vetor que, assim como o potencial escalar $\phi = \phi(\mathbf{r}, t)$, representa no eletromagnetismo uma quantidade mais fundamental que os campos elétrico $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ e magnético $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ (48). Neste sentido,

$$H = \frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \left[\nabla V(\mathbf{r}) \times \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right] \cdot \boldsymbol{\sigma} . \quad (6.2)$$

Para reescrever o hamiltoniano em (6.2) numa forma mais simples devemos desenvolver o termo puramente quadrático,

$$\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 = \mathbf{p}^2 + \frac{e}{c} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \mathbf{A}^2 . \quad (6.3)$$

Muito embora o comutador entre os operadores momentum linear $\mathbf{p}$ e campo de radiação $\mathbf{A}$ não seja nulo, a partir dele podemos extrair um vínculo facilmente demonstrável entre estas quantidades (63),

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + [\mathbf{p}, \mathbf{A}] = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} - i\hbar \nabla \cdot \mathbf{A} . \quad (6.4)$$

Como os cálculos independem de uma particular escolha de calibre, podemos trabalhar no contexto do *gauge* de Coulomb onde a identidade $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ é sempre válida. Desta forma, temos $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$. É importante ressaltar que este resultado não indica que as componentes do momentum linear $\mathbf{p}$ comutam em relação às do potencial vetor. Assim,

$$\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 = \mathbf{p}^2 + \frac{2e}{c} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \mathbf{A}^2 . \quad (6.5)$$

Substituindo (6.5) na equação (6.2), o hamiltoniano que descreve a interação radiação-matéria na figura do elétron de condução pode ser escrito como

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + \frac{e}{m_0c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{2m_0c^2} \mathbf{A}^2 . \quad (6.6)$$

Ainda não conhecemos a versão do hamiltoniano de Kane no contexto da interação elétron-fóton. Nossa próxima tarefa então se resumirá na análise da equação (6.6) sob a perspectiva do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Como vimos no capítulo 2, a essência deste método está na projeção do hamiltoniano na base de autoestados de Bloch,

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad (6.7)$$

onde apenas para relembrar a função $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ carrega a mesma periodicidade do potencial cristalino $V(\mathbf{r})$. Ao final da projeção encontraremos uma equação efetiva para a parte periódica das funções de Bloch semelhante àquela expressa em (2.7), diferindo apenas por termos dependentes em potências do potencial vetor $\mathbf{A}$. Nesta base de autoestados, o hamiltoniano de Pauli obedece a equação de autovalor

$$H\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{n,\mathbf{k}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) . \quad (6.8)$$

Uma vez que o potencial vetor não influi de maneira direta em $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, os únicos termos do hamiltoniano que realmente requerem preocupação são aqueles dependentes do operador momentum linear $\mathbf{p}$. Como no capítulo 2, é trivial mostrar que

$$\mathbf{p}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad \mathbf{p}^2\psi_{n,\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} (\mathbf{p}^2 + 2\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \hbar^2k^2) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) . \quad (6.9)$$

Neste sentido, substituindo (6.6), (6.7) e (6.9) na equação (6.8), após desenvolver os termos e fazer algumas manipulações algébricas encontramos a seguinte equação efetiva para a parte periódica da função de Bloch

$$\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} \right\} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \left\{ \frac{e^2}{2m_0c^2} \mathbf{A}^2 + \frac{e}{m_0c} \mathbf{A} \cdot (\hbar\mathbf{k} + \boldsymbol{\pi}) \right\} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left(\varepsilon_{n,\mathbf{k}} - \frac{\hbar^2k^2}{2m_0} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad (6.10)$$

onde, analogamente a definição adotada no capítulo 2,

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] . \quad (6.11)$$

O elemento $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}$ à esquerda da equação (6.10) naturalmente atribui o nome ao método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ na ausência da interação spin-órbita dada em (6.11), sendo identicamente nulo para $\mathbf{k} = 0$. Dada a equação efetiva em (6.10) estamos prontos para discutir o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ na presença do campo de radiação. Partindo de argumentos similares aqueles apresentados no capítulo 2, para um inteiro n e uma escolha do vetor de Bloch, por exemplo $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, o conjunto de funções $u_{n,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ forma uma base ortonormal completa no espaço vetorial das funções periódicas na cela unitária. Assim, qualquer função $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ pode naturalmente ser expandida em função de uma combinação linear dos elementos desta base,

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^N a_{nl}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) u_{l,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) . \quad (6.12)$$

O problema fica razoavelmente mais simples se tomarmos a expansão em torno do ponto de mais alta simetria da cela unitária. Em se tratando de semicondutores de gap direto, escolhemos então o ponto Γ , onde $\mathbf{k}_0 = 0$. Assim, definindo $a_{nl}(\mathbf{k}, 0) = a_{nl}(\mathbf{k})$, temos

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^N a_{nl}(\mathbf{k}) u_{l,0}(\mathbf{r}) . \quad (6.13)$$

Uma consequência desta escolha para o ponto $\mathbf{k}_0$ está no fato de que $u_{l,0}(\mathbf{r})$ é naturalmente autoestado de H com autovalor $\varepsilon_{l,0}$,

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{p} \right) u_{l,0}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{l,0} u_{l,0}(\mathbf{r}) . \quad (6.14)$$

Nossa tarefa consiste agora em determinar cada coeficiente $a_{nl}(\mathbf{k})$ da expansão assumindo que as funções $u_{l,0}(\mathbf{r})$ são previamente conhecidas. Para tanto, substituindo (6.13) na equação (6.10),

$$\sum_{l=1}^N a_{nl}(\mathbf{k}) \left[\varepsilon_{l,0} - \varepsilon_{n,\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{\hbar}{m_0} \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\pi} \right] u_{l,0}(\mathbf{r}) = 0 . \quad (6.15)$$

Multiplicando a equação (6.15) à esquerda pela função $u_{s,0}^*(\mathbf{r})$ e integrando sobre todo o volume da cela unitária, temos a representação da equação (6.10) na base de estados do

hamiltoniano H ,

$$\sum_{l=1}^N \left\{ \left[\varepsilon_{l,0} - \varepsilon_{n,\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 \right] \delta_{l,s} + \frac{\hbar}{m_0} \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \cdot \langle s|\pi|l \rangle \right\} a_{nl}(\mathbf{k}) = 0, \quad (6.16)$$

onde $\langle \mathbf{r}|l \rangle = u_{l,0}(\mathbf{r})$ e para encontrar a equação anterior recorreremos a ortonormalidade dos autoestados da base, além de definir o seguinte elemento de matriz

$$\langle s|\pi|l \rangle = \int d^3\mathbf{r} u_{s,0}^*(\mathbf{r}) \pi u_{l,0}(\mathbf{r}). \quad (6.17)$$

Comparando este resultado com a equação (2.14), concluímos que o efeito do acoplamento mínimo nas componentes do vetor de onda se resume a correspondência

$$\mathbf{k} \longrightarrow \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}. \quad (6.18)$$

Em outras palavras, toda a formulação do modelo de Kane desenvolvida para a mono-estrutura no capítulo 2 é também válida no âmbito da interação elétron-fóton desde que considerada a transformação em (6.18). Mais que isso, este resultado também se aplica indiscriminadamente à heteroestrutura, aliado ainda a correção nas energias do sistema pela introdução de potenciais dependentes de posição e da transição do vetor de onda ao nível de um operador diferencial. Assim, não há aqui necessidade de refazer todos os cálculos que conduziram à equação efetiva para as funções envelope. O leitor interessado em analisar o desenvolvimento destes cálculos em detalhes pode consultar as referências (43, 56).

6.2 A equação efetiva com o campo de radiação

Na seção 6.1 estudamos os efeitos do acoplamento mínimo introduzido na equação de Pauli sobre o hamiltoniano de Kane. Em geral, vimos que o papel do campo de radiação se resume na correspondência $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + (e/\hbar c) \mathbf{A}$ na equação vinda da projeção do hamiltoniano de Kane na base de estados de Bloch. Discutimos ainda que esta prescrição

se aplica tanto para o semicondutor na fase *bulk* quanto na heteroestrutura. Neste último caso, como já sabido, há ainda a introdução de potenciais dependentes da posição e a promoção do vetor de onda ao nível de operador diferencial, resultados que se aplicam inclusive na presença de campos externos.

A pergunta que queremos responder agora é a seguinte: como fica a equação efetiva que descreve o elétron de condução agora que temos a interação devida a presença de campos eletromagnéticos? Mais que isso, como o modelo de Kane 8×8 deve ser modificado de tal forma que incorpore os efeitos do campo de radiação? Já sabemos que o vetor de onda sofre a transformação dada em (6.18). Diga-se de passagem, não há nada que nos impeça de trabalhar com a mesma base de autofunções $u_{i,0}(\mathbf{r})$ apresentada no capítulo 2 para calcular a projeção do hamiltoniano de Kane em (6.16). Assim, usaremos a mesma base de oito estados na qual o operador spin-órbita H_{so} é diagonal. De fato, a menos da correspondência $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + (e/\hbar c)\mathbf{A}$, no que diz respeito a matriz de Kane 8×8 os resultados obtidos aqui serão os mesmos que aqueles obtidos no capítulo 2 na ausência de campos externos. Entretanto, ainda não podemos afirmar o mesmo para a equação efetiva uma vez que a presença do potencial vetor pode induzir correções bastante sutis.

Buscando facilitar um pouco nosso trabalho e evitar qualquer tipo de prolixidade, todos os cálculos desenvolvidos nesta seção terão sempre em mente a heteroestrutura semicondutora na figura do poço quântico. Ao final, para encontrar os resultados relativos à monoestrutura, basta anular o potencial estrutural do poço quântico e recobrar o caráter puramente numérico das coordenadas do vetor de onda.

Antes mesmo de construir o hamiltoniano de Kane 8×8 para a heteroestrutura levando em conta os efeitos do campo de radiação, vimos no capítulo 2 através da aproximação das funções envelope que as energias do sistema são corrigidas pela introdução de potenciais dependentes da posição. Como a presença de campos eletromagnéticos induz a transformação (6.18) no vetor de onda, temos

$$E_l(z) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 + V_l(z) - E_{gl} , \quad (6.19)$$

onde $l = (0, 1, 2, 3)$ e as energias E_{gl} dependem do gap E_g , do *split-off* do campo cristalino

Δ_c e do acoplamento spin-órbita Δ_{so} , ou seja, parâmetros ligados diretamente a estrutura de bandas do material,

$$E_{g0} = 0, \quad E_{g1} = E_g, \quad E_{g2} = E_g + \Delta_c, \quad E_{g3} = E_g + \Delta_c + \Delta_{so}. \quad (6.20)$$

Feitos os devidos adendos, conforme explicamos nos parágrafos precedentes é bem intuitivo pensar que mesmo com o campo de radiação o hamiltoniano de Kane 8×8 seja escrito similarmente àquele obtido no capítulo 2,

$$H = \begin{bmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{cv}^\dagger & H_v \end{bmatrix}. \quad (6.21)$$

Cada elemento desta matriz possui as mesmas interpretações dantes discutidas no capítulo 3. O bloco H_c , uma matriz de dimensão 2×2 , depende do potencial vetor através da energia E_0 dada em (6.19) para o caso $l = 0$,

$$H_c = E_0 \mathbb{1}_{2 \times 2}. \quad (6.22)$$

O bloco H_{cv} , vindo de contribuições devidas a ambas bandas de condução e valência, é caracterizado pelo vetor linha

$$H_{cv} = \begin{bmatrix} \mathbb{M}_1 & \mathbb{M}_2 & \mathbb{M}_3 \end{bmatrix}, \quad (6.23)$$

onde $\mathbb{M}_1$, $\mathbb{M}_2$ e $\mathbb{M}_3$ representam as mesmas matrizes de dimensão 2×2 discutidas no capítulo 3, mas agora corrigidas pela introdução das componentes do potencial vetor $\mathbf{A}$,

$$\mathbb{M}_1 = \frac{2\overline{P}_1}{\sqrt{6}} \mathbf{M} \cdot \left(\mathbf{k}_\parallel + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_\parallel \right) + \frac{2P_2}{\sqrt{6}} M_z \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right), \quad (6.24)$$

$$\mathbb{M}_2 = \frac{2\overline{P}_1}{\sqrt{6}} \mathbf{N} \cdot \left(\mathbf{k}_\parallel + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_\parallel \right) + \frac{2P_2}{\sqrt{6}} N_z \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right), \quad (6.25)$$

$$\mathbb{M}_3 = -\frac{\overline{P}_1}{\sqrt{3}} \sigma \cdot \left(\mathbf{k}_\parallel + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_\parallel \right) - \frac{P_2}{\sqrt{3}} \sigma_z \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right). \quad (6.26)$$

Aqui, $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, onde σ_j são as matrizes de Pauli, e as componentes dos vetores $\mathbf{M}$ e $\mathbf{N}$ são dadas pelas equações (3.5) e (3.6), respectivamente. Assim como $\mathbf{k}_\parallel$ representa o vetor de onda no plano, $\mathbf{A}_\parallel = (A_x, A_y)$ define o potencial vetor no plano xy . O bloco H_v de dimensão 6×6 , resultado devido a contribuições da banda de valência, possui a mesma

interpretação já discutida no capítulo 3. Em linhas gerais, é convenientemente separado na soma

$$H_v = H_{vD} + H_{vT} . \quad (6.27)$$

A matriz H_{vD} , puramente diagonal, pode ser recobrada naturalmente através da equação (3.8) mas, assim como H_c , deve ter a dependência nas energias E_1 , E_2 e E_3 corrigidas segundo (6.19). O bloco H_{vT} , que representa uma matriz de traço identicamente nulo, também é corrigido via (6.18) no intuito de incluir as coordenadas do potencial vetor,

$$\begin{aligned} H_{vT} = \frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}} & \begin{bmatrix} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{3}} \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix} \left\{ (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \frac{e}{\hbar c} (A_y \sigma_x - A_x \sigma_y) \right\} + \\ & + \frac{\sqrt{2}}{3} \tilde{P}_1 \begin{bmatrix} 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & i\sqrt{2} N_z k_- & iM_x k_- \\ -i\sqrt{2} M_z k_+ & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & -iN_x k_+ \\ -iM_x k_+ & iN_x k_- & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix} + \\ & + \frac{e\sqrt{2}}{3\hbar c} \tilde{P}_1 \begin{bmatrix} 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & i\sqrt{2} N_z A_- & iM_x A_- \\ -i\sqrt{2} M_z A_+ & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & -iN_x A_+ \\ -iM_x A_+ & iN_x A_- & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix} , \quad (6.28) \end{aligned}$$

onde $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ e ainda $A_{\pm} = A_x \pm iA_y$. Vale ressaltar ao leitor que os blocos H_c , H_{cv} e H_v são escritos tendo em vista a aproximação quase-cúbica onde $\tilde{P}_1 \neq 0$, ou seja, o acoplamento entre a banda de condução e a banda de *split-off* do campo cristalino não é nulo. Para mais detalhes, consulte o capítulo 2.

Agora que sabemos como o hamiltoniano de Kane 8×8 deve se modificar para incluir a interação devida ao campo de radiação na figura do potencial vetor $\mathbf{A}$, a próxima fase no cálculo do hamiltoniano efetivo diz respeito ao *folding down*. Naturalmente, surge a questão: devemos refazer todos os cálculos que envolvem o *folding down* no intuito de encontrar uma equação efetiva para o espinor da banda de condução ψ_0 desacoplada do espinor da banda de valência ψ_v ? A resposta à pergunta é não, ou seja, todo o longo raciocínio desenvolvido acerca do *folding down* na seção 3.1 será igualmente aplicável

aqui. Assim, segundo a equação (3.19),

$$E\psi_0 = \left(E_0\mathbb{1}_{2\times 2} + H_{cv}\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{cv}^\dagger\right)\psi_0 + H_{cv}\left(\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{vT}\tilde{H}_{vD}^{-1}\right)H_{cv}^\dagger\psi_0 + \dots \quad (6.29)$$

Note que a única diferença entre estes resultados e aqueles obtidos para o *folding down* no capítulo 3 será devida a dependência das novas matrizes H_{cv} e H_{vT} nas componentes do potencial vetor $\mathbf{A}$. Assim como H_{vD} , a matriz diagonal $\tilde{H}_{vD}$ dada em (3.8) deve ser corrigida para incluir o potencial vetor nas energias $E - E_l$, onde $l = 1, 2, 3$ e E é naturalmente o autovalor de energia do hamiltoniano de Kane. Como já discutido no capítulo 3, a equação efetiva para ψ_0 é fruto de um processo de linearização em primeira ordem nos denominadores de energia presentes na equação (6.29). Visto que $\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{vT}\tilde{H}_{vD}^{-1} \propto E_{gi}^{-2}$, truncamos a expansão em série para compreender apenas os termos

$$\left(E_0\mathbb{1}_{2\times 2} + H_{cv}\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{cv}^\dagger\right)\psi_0 = E\psi_0. \quad (6.30)$$

No regime de aproximação em primeira ordem no inverso do gap de energia, caso que realmente nos interessa por hora na descrição da heteroestrutura, o produto $H_{cv}\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{cv}^\dagger$ é obtido via a equação (3.27),

$$H_{cv}\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{cv}^\dagger\psi_0 \simeq \frac{1}{E_{g1}}\mathbb{M}_1\mathbb{M}_1^\dagger\psi_0 + \frac{1}{E_{g2}}\mathbb{M}_2\mathbb{M}_2^\dagger\psi_0 + \frac{1}{E_{g3}}\mathbb{M}_3\mathbb{M}_3^\dagger\psi_0, \quad (6.31)$$

onde as matrizes $\mathbb{M}_1$, $\mathbb{M}_2$ e $\mathbb{M}_3$ podem ser consultadas nas equações (6.24)–(6.26). Se quisermos encontrar a equação efetiva para o espinor ψ_0 associado a banda de condução devemos saber calcular cada produto $\mathbb{M}_l\mathbb{M}_l^\dagger$. No capítulo 3 nos deparamos com este mesmo problema, muito embora os cálculos foram efetivamente mais simples uma vez que nos limitamos a descrição de um caso livre de campos externos. Buscando poupar expressões desnecessárias e descarregar o texto, apresentamos no apêndice E em detalhes todas as passagens algébricas necessárias para determinar os produtos $\mathbb{M}_l\mathbb{M}_l^\dagger$. Assim, substituindo

aqui apenas as expressões (E.20), (E.22) e (E.25), a equação (6.31) é reescrita na forma

$$\begin{aligned}
H_{cv}\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{cv}^{\dagger}\psi_0 = & -\frac{\bar{P}_1P_2}{3}\left(\frac{1}{E_{g1}}-\frac{1}{E_{g2}}\right)\left(\Sigma+\frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}_{\parallel}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\left(k_z+\frac{e}{\hbar c}A_z\right)\psi_0+ \\
& +\left\{\frac{\bar{P}_1^2}{6}\left(\frac{3}{E_{g1}}+\frac{1}{E_{g2}}+\frac{2}{E_{g3}}\right)\left(\mathbf{k}_{\parallel}+\frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}_{\parallel}\right)^2+\frac{P_2^2}{3}\left(\frac{2}{E_{g1}}+\frac{1}{E_{g3}}\right)\left(k_z+\frac{e}{\hbar c}A_z\right)^2\right\}\begin{bmatrix}1 & 0 \\ 0 & 0\end{bmatrix}\psi_0+ \\
& +\left\{\frac{\bar{P}_1^2}{6}\left(\frac{1}{E_{g1}}+\frac{3}{E_{g2}}+\frac{2}{E_{g3}}\right)\left(\mathbf{k}_{\parallel}+\frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}_{\parallel}\right)^2+\right. \\
& \left.+\frac{P_2^2}{3}\left(\frac{2}{E_{g2}}+\frac{1}{E_{g3}}\right)\left(k_z+\frac{e}{\hbar c}A_z\right)^2\right\}\begin{bmatrix}0 & 0 \\ 0 & 1\end{bmatrix}\psi_0. \quad (6.32)
\end{aligned}$$

Do ponto de vista algébrico, a idéia para simplificar esta equação consiste em decompor cada matriz em função de outras previamente conhecidas. Em particular, podemos fatorá-las através da soma e diferença entre a identidade $\mathbf{1}_{2\times 2}$ e a matriz de Pauli σ_z ,

$$\begin{bmatrix}1 & 0 \\ 0 & 0\end{bmatrix} = \frac{1}{2}(\mathbf{1}_{2\times 2} + \sigma_z), \quad \begin{bmatrix}0 & 0 \\ 0 & 1\end{bmatrix} = \frac{1}{2}(\mathbf{1}_{2\times 2} - \sigma_z). \quad (6.33)$$

Substituindo este resultado na equação (6.32) e rearranjando alguns termos, dispomos de uma forma geral e definitiva para escrever o produto $H_{cv}\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{cv}^{\dagger}$ no âmbito da interação entre o elétron de condução e o campo de radiação,

$$\begin{aligned}
H_{cv}\tilde{H}_{vD}^{-1}H_{cv}^{\dagger}\psi_0 = & \frac{\bar{P}_1^2}{6}\left\{2\left(\frac{1}{E_{g1}}+\frac{1}{E_{g2}}+\frac{1}{E_{g3}}\right)\mathbf{1}_{2\times 2}+\left(\frac{1}{E_{g1}}-\frac{1}{E_{g2}}\right)\sigma_z\right\}\left(\mathbf{k}_{\parallel}+\frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}_{\parallel}\right)^2\psi_0+ \\
& +\frac{P_2^2}{3}\left\{\left(\frac{1}{E_{g1}}+\frac{1}{E_{g2}}+\frac{1}{E_{g3}}\right)\mathbf{1}_{2\times 2}+\left(\frac{1}{E_{g1}}-\frac{1}{E_{g2}}\right)\sigma_z\right\}\left(k_z+\frac{e}{\hbar c}A_z\right)^2\psi_0+ \\
& -\frac{\bar{P}_1P_2}{3}\left(\frac{1}{E_{g1}}-\frac{1}{E_{g2}}\right)\left(\Sigma+\frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}_{\parallel}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\left(k_z+\frac{e}{\hbar c}A_z\right)\psi_0. \quad (6.34)
\end{aligned}$$

Como seria natural esperar, tomando nulo o potencial vetor $\mathbf{A}$ nesta equação recobramos exatamente o mesmo resultado encontrado em (3.34) na ausência de campos externos. Analogamente ao que foi observado no capítulo 3, se considerarmos a parametrização cúbica onde $\vartheta = 0$, a correspondência $\bar{P}_1 \rightarrow P_1$ no parâmetro de Kane será a única mudança efetiva imposta a esta equação. Curiosamente, esta propriedade se estende também na presença do campo de radiação, o que reforça ainda mais sua robustez. Dado o caso $l = 0$, a equação (6.19) fornece a dependência da energia E_0 com as componentes

do vetor de onda $\mathbf{k}$ e do potencial vetor $\mathbf{A}$. Separando esta expressão em termos das componentes paralela e perpendicular destas quantidades, temos

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\mathbf{k}_{\parallel} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_{\parallel} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right)^2 + V_0(z) . \quad (6.35)$$

Agora temos plenas condições de calcular a equação efetiva para o espinor ψ_0 . Para tanto, o passo decisivo neste processo será inserir (6.34) e (6.35) no lado esquerdo da equação (6.30), o que resulta

$$\begin{aligned} \left(E_0 \mathbf{1}_{2 \times 2} + H_{cv} \tilde{H}_{vD}^{-1} H_{cv}^{\dagger} \right) \psi_0 = & \left\{ \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_0} + \frac{2\bar{P}_1^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_{g1}} + \frac{1}{E_{g2}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \right] \left(\mathbf{k}_{\parallel} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_{\parallel} \right)^2 + \right. \\ & \left. + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_0} + \frac{2P_2^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_{g1}} + \frac{1}{E_{g2}} + \frac{1}{E_{g3}} \right) \right] \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right)^2 + V_0(z) \right\} \mathbf{1}_{2 \times 2} \psi_0 + \\ & + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\bar{P}_1^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_{g1}} - \frac{1}{E_{g2}} \right) \left(\mathbf{k}_{\parallel} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_{\parallel} \right)^2 + \frac{2P_2^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_{g1}} - \frac{1}{E_{g2}} \right) \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right)^2 \right] \sigma_z \psi_0 + \\ & - \frac{\bar{P}_1 P_2}{3} \left(\frac{1}{E_{g1}} - \frac{1}{E_{g2}} \right) \left(\Sigma + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right) \psi_0 . \quad (6.36) \end{aligned}$$

Mesmo superficialmente, é possível identificar na equação (6.36) as mesmas massas efetivas dependentes de spin definidas na seção 3.2.1. Convém deixar claro que cada massa efetiva apresenta uma dependência própria quanto aos gaps observados na estrutura de bandas do material semiconductor. Em especial, enquanto $M_{\parallel}$, $M_{\perp}$ e $\gamma_{1,12}$ são funções do gap E_g e do *split-off* do campo cristalino Δ_c , as massas $m_{\parallel}$ e $m_{\perp}$ variam com o acoplamento spin-órbita Δ_{so} . Isto pode ser facilmente constatado via a análise das equações (3.36)–(3.39) que, inseridas na equação (6.36), levam ao hamiltoniano que descreve um elétron na banda de condução de um semiconductor de estrutura hexagonal em primeira ordem no inverso do gap de energia na presença do campo de radiação, ou seja,

$$\begin{aligned} H' = & \left[\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \left(\mathbf{k}_{\parallel} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_{\parallel} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right)^2 + V_0(z) \right] \mathbf{1}_{2 \times 2} + \\ & + \left[\frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} \left(\mathbf{k}_{\parallel} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_{\parallel} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right)^2 \right] \sigma_z - \gamma_{1,12} \left(\Sigma + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right) . \quad (6.37) \end{aligned}$$

O leitor atento perceberá um aspecto muito intrigante neste resultado. Aparentemente, em primeira ordem de aproximação no inverso do gap de energia para a heteroestrutura, a

equação (6.37) indica que a única mudança no hamiltoniano efetivo associado ao espinor ψ_0 é dada pela transformação $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + (e/\hbar c) \mathbf{A}$ quando existe a interação devida ao campo eletromagnético. Em outras palavras, se tomarmos o potencial vetor identicamente nulo, esta equação recobra imediatamente o resultado obtido para o hamiltoniano efetivo em (3.41) na ausência de campos externos. Entretanto, este resultado pode não ser muito evidente se levarmos em conta correções em segunda ordem no gap de energia. Exemplo disso pode ser observado no caso cúbico (43), onde é notável a presença de produtos envolvendo derivadas do potencial estrutural do poço quântico e as componentes do potencial vetor.

A idéia que permeia a introdução do campo de radiação no problema está centrada no cálculo de intensidades associadas a possíveis transições ópticas através da absorção de um fóton pelo elétron de condução. Em particular, queremos determinar a probabilidade de transição por unidade de tempo relativa a excitações eletrônicas entre os estados do sistema ao incidir um feixe de luz com comprimento de onda adequado na estrutura semicondutora. Conforme comentaremos na próxima seção, uma vez que o campo de radiação representa uma onda eletromagnética que oscila no tempo, ou seja, $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, nada mais natural pensar que o hamiltoniano efetivo também depende do tempo, isto é, $H' = H'(t)$. Assim, todos os termos em função do potencial vetor na equação (6.37) serão tratados perturbativamente no cálculo destas taxas de transição via resultados bem conhecidos da teoria quântica que descreve a interação radiação matéria (16,17,59). Este tratamento será mais simples se separarmos as contribuições eletrônicas daquelas exclusivamente devidas ao potencial vetor no hamiltoniano efetivo, ou seja,

$$\begin{aligned}
 H' = & \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} k_z^2 + V_0(z) \right\} \mathbf{1}_{2 \times 2} + \left\{ \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} k_z^2 \right\} \sigma_z - \gamma_{1,12} \Sigma k_z + \\
 & + \frac{2e}{\hbar c} \left\{ \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{A} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} k_z A_z \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} + \left(\frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} \mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{A} + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} k_z A_z \right) \sigma_z + \right. \\
 & - \frac{1}{2} \gamma_{1,12} [\Sigma A_z + (\mathbf{A}_{\parallel} \cdot \sigma) k_z] \left. \right\} + \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 \left\{ \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} A_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} A_z^2 \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} + \right. \\
 & \left. + \left(\frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} A_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} A_z^2 \right) \sigma_z - \gamma_{1,12} (\mathbf{A}_{\parallel} \cdot \sigma) A_z \right\} . \quad (6.38)
 \end{aligned}$$

Na primeira linha da equação (6.38) está o hamiltoniano efetivo em primeira ordem no

inverso do gap de energia que encontramos no capítulo 3, onde a interação dependente de spin é devida ao operador helicidade no plano Σ . A partir da segunda linha estão os termos dependentes das coordenadas do potencial vetor. Dado que $\mathbf{k}_{\parallel}$ e $\mathbf{A}_{\parallel}$ são vetores definidos no plano xy , a identidade $\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{A}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{A}$ é lícita. O cálculo das taxas de transição óptica via teoria de perturbação dependente do tempo (17, 49) predispõe um conhecimento dos autoestados eletrônicos do sistema já estudados no capítulo 4. Lá, entretanto, submetemos o hamiltoniano efetivo à ação da transformação de similaridade que diagonaliza o operador helicidade. Apenas para relembrar, esta operação é caracterizada pela matriz unitária Λ apresentada em (4.2). Assim, para aproveitar todos os resultados do capítulo 4 devemos proceder no mesmo sentido,

$$H''(t) = \Lambda^{-1} H'(t) \Lambda = \widetilde{H} + W(t) + \Xi(t). \quad (6.39)$$

Aqui, $\widetilde{H}$ representa o mesmo hamiltoniano efetivo em primeira ordem que descreve o elétron de condução na ausência de campos externos calculado na equação (4.8),

$$\widetilde{H} = \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} k_z^2 + V_0(z) \right\} \mathbb{1}_{2 \times 2} - \left\{ \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} k_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} k_z^2 \right\} \sigma_x - \gamma_{1,12} k_{\parallel} k_z \sigma_z. \quad (6.40)$$

O hamiltoniano $W(t)$, que varia linearmente nas coordenadas do potencial vetor, descreve o acoplamento entre o elétron de condução e o campo de radiação,

$$W(t) = \frac{2e}{\hbar c} \left\{ (\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{A}) \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \mathbb{1}_{2 \times 2} - \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} \sigma_x - \frac{1}{2k_{\parallel}} \gamma_{1,12} k_z \sigma_z \right) - \frac{1}{2k_{\parallel}} \gamma_{1,12} [\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{\parallel} \times \mathbf{A})] k_z \sigma_y + \right. \\ \left. + (\hat{z} \cdot \mathbf{A}) \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} k_z \mathbb{1}_{2 \times 2} - \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} k_z \sigma_x - \frac{1}{2} \gamma_{1,12} k_{\parallel} \sigma_z \right) \right\}. \quad (6.41)$$

A assinatura do acoplamento elétron-fóton é vista nos produtos $k_j A_l$ entre as componentes do vetor de onda e do potencial vetor, interação análoga àquela $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ que emerge naturalmente no hamiltoniano de Kane devido a introdução do acoplamento mínimo na equação de Pauli. Além disso, como $W(t)$ também possui contribuições dependentes de spin, poderemos observar excitações eletrônicas mediadas por transições nos estados $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ de σ_z . Por fim, o hamiltoniano $\Xi(t)$ depende de potências em segunda ordem nas coordenadas do potencial vetor e está diretamente relacionado a interações envolvendo

dois fótons,

$$\Xi(t) = \left(\frac{e}{\hbar c}\right)^2 \left\{ \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} A_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} A_z^2 \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} - \left(\frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} A_{\parallel}^2 + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} A_z^2 \right) \sigma_x + \right. \\ \left. - \frac{1}{k_{\parallel}} \gamma_{1,12} [(\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{A}) \sigma_z + \hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{\parallel} \times \mathbf{A}) \sigma_y] A_z \right\}. \quad (6.42)$$

Mesmo utilizando resultados bem conhecidos de teoria de perturbação dependente do tempo, as transições ópticas envolvendo a classe de interações mediadas pelo hamiltoniano $\Xi(t)$ seriam mais facilmente descritas através do conjunto de regras diagramáticas desenvolvido por Feynman (13,16). Além de fugir do escopo deste trabalho uma vez que estamos interessados na absorção de um único fóton, este tratamento é dispensável dado que as intensidades associadas a este acoplamento são em geral menores que aquelas observadas para o termo $W(t)$. Por este motivo, manteremos nossa atenção voltada apenas para a parcela $W(t)$, entendida aqui como uma perturbação dependente do tempo ao hamiltoniano puramente eletrônico $\widetilde{H}$.

Na seção 6.3 relembremos rapidamente alguns aspectos que envolvem a quantização do potencial vetor $\mathbf{A}$. Vamos apresentar ainda algumas ferramentas necessárias para o cálculo das taxas de transição óptica que desenvolveremos a partir da seção 6.4.

6.3 A aproximação de dipolo elétrico

Muito embora já tenhamos considerado em detalhes os efeitos do campo de radiação na equação efetiva para o espinor ψ_0 , ainda não dissemos nada a respeito do potencial vetor $\mathbf{A}$. Assim, nesta seção discutiremos rapidamente as idéias que conduzem à quantização do campo eletromagnético, pontuando os motivos que nos levam a trabalhar no regime de aproximação de dipolo elétrico. O leitor familiarizado com estes conceitos pode suprimir a leitura desta seção sem prejuízo ao entendimento das demais.

As equações de Maxwell representam um conjunto de equações diferenciais parciais de

primeira ordem acopladas que relacionam os campos elétrico $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ e magnético $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ às densidades de corrente $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ e carga eletrônica $\rho(\mathbf{r}, t)$ (64). Entretanto, é possível expressar estes campos em termos de quantidades mais fundamentais que induzem naturalmente um conjunto de equações diferenciais de segunda ordem. Em particular, uma vez que o campo magnético é solenoidal, ou seja, $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, podemos escrevê-lo em termos do potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$,

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} . \quad (6.43)$$

Analogamente, através deste resultado a lei de Faraday relaciona o campo elétrico e a derivada temporal do potencial vetor via o gradiente de uma função escalar arbitrária, o chamado potencial escalar $\phi(\mathbf{r}, t)$,

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} . \quad (6.44)$$

O leitor pode perceber que estamos adotando aqui o sistema de unidades *cgs* ou *gaussiano*, e assim o será até que se diga o contrário. Uma característica marcante dos potenciais vetor e escalar está na invariância por transformações de calibre, ou seja, $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ e $\phi(\mathbf{r}, t)$ são definidos, respectivamente, a menos do gradiente e da derivada parcial no tempo de uma função arbitrária $f(\mathbf{r}, t)$. Uma vez que a escolha do calibre é arbitrária, tomando o calibre de Coulomb* onde $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, pode ser facilmente demonstrado (17, 64) que na ausência de cargas livres e fontes externas o potencial vetor satisfaz a equação de onda

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0 . \quad (6.45)$$

Esta equação diferencial parcial homogênea é separável nas coordenadas espaciais e temporal, de tal forma que é natural propor o *ansatz*

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{i\omega_q t} , \quad (6.46)$$

onde a constante de separação ω_q representa a frequência de oscilação da onda eletromagnética com vetor de propagação $\mathbf{q}$. Inserindo (6.46) em (6.45), temos uma nova equação

*O calibre ou *gauge* de Coulomb também é conhecido como *gauge* transverso ou de radiação. Na representação do potencial vetor em termos de ondas planas de momento $\mathbf{q}$ e versor de polarização $\epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha$, este calibre expressa a condição de transversalidade do campo eletromagnético, ou seja, $\mathbf{q} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha = 0$.

diferencial para as coordenadas espaciais

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega_q^2}{c^2} \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0 . \quad (6.47)$$

A solução mais simples desta equação está relacionada à descrição do campo eletromagnético em termos de modos normais. Em outras palavras, basta assumir que a onda eletromagnética tem sua propagação limitada a uma cavidade. Modos normais surgem devido as condições periódicas de contorno que a onda deve obedecer em suas paredes. Se as dimensões da cavidade são muito maiores que qualquer comprimento de onda do campo de radiação, uma medida física deste sistema deve independe de sua forma e tamanho, ou seja, podemos tratar a cavidade sendo um cubo de lado L e volume V sem perda de generalidade. Através da condição de contorno $\mathbf{A}(\mathbf{r} + L\hat{x}_j) = \mathbf{A}(\mathbf{r})$ o vetor de onda $\mathbf{q}$ assume apenas valores múltiplos de números inteiros,

$$\mathbf{q} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z) , \quad \omega_q = qc , \quad (6.48)$$

onde $|\mathbf{q}| = q$, $j = 1, 2, 3$ e $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$. Assim, o potencial vetor geral solução da equação (6.47) é dado em termos de uma superposição de ondas planas através da representação de Fourier

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha} \left\{ c_{\mathbf{q}, \alpha}(t) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + c_{\mathbf{q}, \alpha}^*(t) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \right\} , \quad (6.49)$$

onde $c_{\mathbf{q}, \alpha}(t) = c_{\mathbf{q}, \alpha} e^{-i\omega_q t}$, $\alpha = 1, 2$ e os versores de polarização $\epsilon_{\mathbf{q}}^1$ e $\epsilon_{\mathbf{q}}^2$ são perpendiculares ao vetor de propagação $\mathbf{q}$. Segue imediatamente deste resultado que a energia armazenada no campo eletromagnético é escrita na forma (16, 17)

$$H = \frac{1}{8\pi} \int d^3\mathbf{r} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}) = \frac{V}{2\pi c^2} \sum_{\mathbf{q}, \alpha} \omega_q^2 c_{\mathbf{q}, \alpha}(t) c_{\mathbf{q}, \alpha}^*(t) . \quad (6.50)$$

É possível mostrar que esta energia corresponde àquela de um conjunto de osciladores harmônicos. Para tanto, seja o par de variáveis $P_{\mathbf{q}, \alpha}$ e $Q_{\mathbf{q}, \alpha}$ canonicamente conjugadas com amplitudes clássicas definidas através das transformações

$$Q_{\mathbf{q}, \alpha}(t) = \frac{V}{4\pi c^2} \left\{ c_{\mathbf{q}, \alpha}(t) + c_{\mathbf{q}, \alpha}^*(t) \right\} , \quad P_{\mathbf{q}, \alpha}(t) = -\frac{i\omega_q V}{4\pi c^2} \left\{ c_{\mathbf{q}, \alpha}(t) - c_{\mathbf{q}, \alpha}^*(t) \right\} . \quad (6.51)$$

Dada a dependência temporal de $c_{\mathbf{q},\alpha}(t)$, valem as identidades

$$\dot{Q}_{\mathbf{q},\alpha} = P_{\mathbf{q},\alpha} , \quad \dot{P}_{\mathbf{q},\alpha} = -\omega_q^2 Q_{\mathbf{q},\alpha} . \quad (6.52)$$

Substituindo a transformação canônica dada em (6.51) na equação (6.50), então a energia do campo eletromagnético é exatamente igual ao hamiltoniano de um conjunto de osciladores harmônicos simples,

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q},\alpha} \left(P_{\mathbf{q},\alpha}^2 + \omega_q^2 Q_{\mathbf{q},\alpha}^2 \right) . \quad (6.53)$$

Em outras palavras, cada modo do campo de radiação é equivalente a um único oscilador harmônico. Através desta característica quantizaremos o campo eletromagnético clássico. Isto pode ser feito reinterpretando as variáveis canônicas $Q_{\mathbf{q},\alpha}$ e $P_{\mathbf{q},\alpha}$ como operadores que satisfazem as relações de comutação,

$$[Q_{\mathbf{q},\alpha}, P_{\mathbf{q}',\alpha'}] = i\hbar \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \delta_{\alpha,\alpha'} , \quad [Q_{\mathbf{q},\alpha}, Q_{\mathbf{q}',\alpha'}] = [P_{\mathbf{q},\alpha}, P_{\mathbf{q}',\alpha'}] = 0 . \quad (6.54)$$

Além disso, podemos redefinir estes operadores em termos dos operadores de criação $a_{\mathbf{q},\alpha}^\dagger$ e destruição $a_{\mathbf{q},\alpha}$,

$$Q_{\mathbf{q},\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_q}} \left(a_{\mathbf{q},\alpha}^\dagger + a_{\mathbf{q},\alpha} \right) , \quad P_{\mathbf{q},\alpha} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_q}{2}} \left(a_{\mathbf{q},\alpha}^\dagger - a_{\mathbf{q},\alpha} \right) . \quad (6.55)$$

Estes novos operadores satisfazem relações de comutação similares àsquelas apresentadas na equação (6.54),

$$[a_{\mathbf{q},\alpha}, a_{\mathbf{q}',\alpha'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \delta_{\alpha,\alpha'} , \quad [a_{\mathbf{q},\alpha}, a_{\mathbf{q}',\alpha'}] = [a_{\mathbf{q},\alpha}^\dagger, a_{\mathbf{q}',\alpha'}^\dagger] = 0 . \quad (6.56)$$

Se agora substituirmos (6.55) e (6.56) na equação (6.53) tendo em vista que teremos como resultado um operador, ou seja, o hamiltoniano do campo eletromagnético, então

$$H = \sum_{\mathbf{q},\alpha} \hbar\omega_q \left(a_{\mathbf{q},\alpha}^\dagger a_{\mathbf{q},\alpha} + \frac{1}{2} \right) = \sum_{\mathbf{q},\alpha} \hbar\omega_q \left(N_{\mathbf{q},\alpha} + \frac{1}{2} \right) , \quad (6.57)$$

onde $N_{\mathbf{q},\alpha} = a_{\mathbf{q},\alpha}^\dagger a_{\mathbf{q},\alpha}$ representa o operador número de ocupação de fótons associado ao modo caracterizado pelo par $(\mathbf{q}, \alpha)$ do campo de radiação e satisfaz a equação de autovalor

$$N_{\mathbf{q},\alpha} |n_{\mathbf{q},\alpha}\rangle = n_{\mathbf{q},\alpha} |n_{\mathbf{q},\alpha}\rangle . \quad (6.58)$$

Aqui o ket $|n_{\mathbf{q},\alpha}\rangle$ define o estado número de fótons no espaço de Fock (16, 59) cujos autovalores $n_{\mathbf{q},\alpha} = 0, 1, 2, \dots$ associados são inteiros positivos e indicam o número de fótons com momento $\mathbf{q}$ e polarização α . Note que $|0_{\mathbf{q},\alpha}\rangle$ define o estado fundamental de fótons no espaço de Fock. Os operadores de criação $a_{\mathbf{q},\alpha}^\dagger$ e destruição $a_{\mathbf{q},\alpha}$ de um fóton com vetor de onda $\mathbf{q}$, frequência ω_q e polarização α satisfazem as equações de autovalor

$$a_{\mathbf{q},\alpha}^\dagger |n_{\mathbf{q},\alpha}\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{q},\alpha} + 1} |n_{\mathbf{q},\alpha} + 1\rangle, \quad a_{\mathbf{q},\alpha} |n_{\mathbf{q},\alpha}\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{q},\alpha}} |n_{\mathbf{q},\alpha} - 1\rangle. \quad (6.59)$$

Para o caso do estado de fótons multimodal, ou seja, que inclui várias frequências, vale a separabilidade no produto tensorial

$$|n_{\mathbf{q}_1,\alpha_1}, n_{\mathbf{q}_2,\alpha_2}, \dots, n_{\mathbf{q}_l,\alpha_l}, \dots\rangle = \bigotimes_i^\infty |n_{\mathbf{q}_i,\alpha_i}\rangle. \quad (6.60)$$

Vale ressaltar ainda que todos os estados de fóton no espaço de Fock satisfazem a condição de ortonormalidade

$$\langle n_{\mathbf{q},\alpha} | n_{\mathbf{q}',\alpha'} \rangle = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \delta_{\alpha,\alpha'}. \quad (6.61)$$

Mas, e quanto ao campo de radiação? Para encontrar a forma quantizada do potencial vetor, basta substituir (6.55) na equação (6.51) e resolver o sistema de equações para os coeficientes $c_{\mathbf{q},\alpha}(t)$ e $c_{\mathbf{q},\alpha}^*(t)$. Os cálculos são suficientemente simples tal que encontramos

$$c_{\mathbf{q},\alpha} \longrightarrow \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_q V}} a_{\mathbf{q},\alpha}, \quad c_{\mathbf{q},\alpha}^* \longrightarrow \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_q V}} a_{\mathbf{q},\alpha}^\dagger. \quad (6.62)$$

Finalmente, inserindo (6.62) na equação (6.49), temos a forma do campo de radiação quantizado que utilizaremos no cálculo das taxas de transição óptica,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q},\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_q V}} \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha \left\{ a_{\mathbf{q},\alpha} e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega_q t)} + a_{\mathbf{q},\alpha}^\dagger e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega_q t)} \right\}. \quad (6.63)$$

Agora que temos em mãos a forma quantizada do campo eletromagnético, vamos justificar o uso da aproximação de dipolo elétrico amplamente utilizada no cálculo das taxas de transição óptica na seção 6.4. Em geral, um feixe luminoso com frequências próximas ao vermelho ou infra-vermelho é suficiente para excitar transições eletrônicas. Isto é razoável uma vez que o poço quântico confina o elétron de condução em regiões de poucos nanômetros, frações do comprimento de onda da luz incidente na estrutura

semicondutora. Se o comprimento de onda λ da luz é muito maior que a largura do poço, ou seja, se $|\mathbf{r}| = r \ll \lambda$, então a exponencial dependente da posição no potencial vetor pode ser expandida em série de potências mantendo apenas o primeiro termo não-nulo,

$$e^{\pm i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \approx 1 \pm i\frac{2\pi r}{\lambda} (\hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{r}}) + \dots \quad (6.64)$$

Assim, a onda eletromagnética é praticamente uma constante na região de confinamento tal que o elétron não sofre nenhum tipo de oscilação devido ao campo eletromagnético. É suficiente, portanto, nos manter no regime da aproximação de dipolo elétrico, ou seja,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \approx \sum_{\mathbf{q}', \alpha'} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{q'} V}} \epsilon_{\mathbf{q}'}^{\alpha'} \left\{ a_{\mathbf{q}', \alpha'} e^{-i\omega_{q'} t} + a_{\mathbf{q}', \alpha'}^\dagger e^{+i\omega_{q'} t} \right\}. \quad (6.65)$$

Esta será a forma do potencial vetor utilizada até o final deste capítulo onde estudaremos a absorção de um fóton pelo elétron de condução, processo que corresponde no formalismo de números de ocupação aos estados inicial $|1_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle$ e final $|0_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle$. É importante deixar claro que limitaremos nosso estudo da interação elétron-fóton ao caso de transições diretas e ressonantes, ou seja, além do vetor de onda $\mathbf{k}_\parallel$ do elétron de condução no gás bidimensional se conservar, a energia cedida do fóton para o elétron na absorção é igual a diferença de energia dos níveis ocupados pelo elétron durante a transição (49).

6.4 Heteroestruturas

6.4.1 Uma subbanda

Na seção 4.2.1 estudamos a solução do problema de autovalor associado a projeção do hamiltoniano efetivo $\widetilde{H}$ na base de estados formada pela autofunção $u_0(z)$ do poço quântico degenerada pelos autoestados de spin $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ do operador σ_z . Em suma, dado o número quântico $\mu = \pm 1$ ligado a multiplicidade introduzida pelo grau de liberdade de

spin, os autoestados de $\widetilde{H}$ são

$$|u_0, \mu\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_0\rangle \otimes (|\downarrow\rangle + \mu|\uparrow\rangle) . \quad (6.66)$$

Este resultado significa simplesmente que há dois níveis possíveis a serem populados pelo elétron de condução confinado no poço quântico gerado pela junção semicondutora. Apenas para relembrar ao leitor, a relação de dispersão vinculada ao problema é função da componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano e a superfície de energia gerada no espaço de momentos tem a forma de um parabolóide de revolução,

$$E_\mu(k_{||}) = \mathcal{E}_0 + \mu\beta_{00} + \left(\frac{\hbar^2}{2m_{||}} + \mu\frac{\hbar^2}{2M_{||}} \right) k_{||}^2 . \quad (6.67)$$

O parâmetro β_{00} representa um acoplamento intrasubbanda definido na equação (4.24). Introduzindo o campo de radiação, vimos na seção 6.2 que, além da interação dependente de spin na forma do operador helicidade Σ outrora obtida no capítulo 3, a equação efetiva associada ao espinor ψ_0 da banda de condução ganha contribuições dependentes de potências em primeira e segunda ordem no potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Desprezando os termos no potencial vetor relativos a absorção de dois fótons, a interação entre um fóton e o elétron de condução pode eventualmente levar a uma mistura nos estados de spin, ou seja, numa transição entre $|\downarrow\rangle$ e $|\uparrow\rangle$.

Incidindo luz na heteroestrutura semicondutora, o sistema físico passa a ser caracterizado agora por fótons e pelo elétron de condução confinado no poço quântico. Analisando o modelo de uma subbanda e tomando o caso de um único fóton, o estado inicial do sistema é

$$|u_0, \mu; 1_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle = |u_0, \mu\rangle \otimes |1_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle , \quad (6.68)$$

onde $|1_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle$ representa o estado de um fóton de momento $\mathbf{q}$, frequência ω_q e polarização $\alpha = 1, 2$ no formalismo de número de ocupação inerente a quantização do campo de radiação. Após a absorção do fóton pelo elétron, o estado final de fótons passa a ser o vácuo $|0_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle$. Assim, nesta seção vamos calcular a probabilidade por unidade de tempo relacionada a transição do elétron entre os níveis $|u_0, \mu_2; 1_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle$ e $|u_0, \mu_1; 0_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle$ via absorção de um único fóton. Em outras palavras, dado o termo perturbativo $W(t)$ na equação

(6.41) dependente do potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ que descreve o acoplamento elétron-fóton, desejamos calcular a expressão

$$\frac{P_{\mathbf{q}}^{\alpha}(t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle u_0, \mu_1; 0_{\mathbf{q}, \alpha} | W(0) | u_0, \mu_2; 1_{\mathbf{q}, \alpha} \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_{\mathbf{q}} + E_{\mu_2} - E_{\mu_1}) . \quad (6.69)$$

Esta equação, conhecida como *Regra de Ouro de Fermi*, é uma consequência natural da teoria de perturbação dependente do tempo e pode ser consultada em qualquer livro texto de mecânica quântica (16, 17, 63).

O primeiro passo para determinar a taxa de transição óptica consiste em calcular o elemento de matriz da perturbação $W(t)$ na nova base de estados. Sabendo que a base é separável no produto direto entre os autoestados de $\widetilde{H}$ e os estados de fóton, será mais simples determinar o elemento de matriz tomando cada componente da base isoladamente. Assim, levando em conta a transição entre os níveis $|u_0, \mu_2\rangle$ e $|u_0, \mu_1\rangle$, temos

$$\begin{aligned} \langle u_0, \mu_1 | W(t) | u_0, \mu_2 \rangle = & \frac{2e}{\hbar c} \left\{ (\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{A}) \left[\langle u_0, \mu_1 | \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \mathbf{1}_{2 \times 2} - \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} \sigma_x \right) | u_0, \mu_2 \rangle + \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{2k_{\parallel}} \gamma_{1,12} \langle u_0, \mu_1 | k_z \sigma_z | u_0, \mu_2 \rangle \right] + (\hat{z} \cdot \mathbf{A}) \left[\langle u_0, \mu_1 | \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} k_z \mathbf{1}_{2 \times 2} - \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} k_z \sigma_x \right) | u_0, \mu_2 \rangle + \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{2} \gamma_{1,12} k_{\parallel} \langle u_0, \mu_1 | \sigma_z | u_0, \mu_2 \rangle \right] - \frac{1}{2k_{\parallel}} \gamma_{1,12} [\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{\parallel} \times \mathbf{A})] \langle u_0, \mu_1 | k_z \sigma_y | u_0, \mu_2 \rangle \right\} . \quad (6.70) \end{aligned}$$

Como os operadores de criação $a_{\mathbf{q}, \alpha}$ e destruição $a_{\mathbf{q}, \alpha}^{\dagger}$ presentes no potencial vetor atuam apenas nos estados de fóton, o campo de radiação fica inerte nesta projeção. Ao contrário do que acontece com k_z , um operador diferencial na descrição da heteroestrutura devido a aproximação das funções envelope, as componentes k_x e k_y do vetor de onda paralelas ao plano do gás de elétrons bidimensional não atuam nos estados $|u_n\rangle$. Olhando inicialmente apenas para os termos dependentes das matrizes $\mathbf{1}_{2 \times 2}$, σ_x , σ_y e σ_z , seguem as relações

$$\langle u_0, \mu_1 | \mathbf{1}_{2 \times 2} | u_0, \mu_2 \rangle = \frac{1}{2} (\mu_1 \mu_2 + 1) , \quad \langle u_0, \mu_1 | \sigma_x | u_0, \mu_2 \rangle = \frac{1}{2} (\mu_1 + \mu_2) , \quad (6.71)$$

$$\langle u_0, \mu_1 | \sigma_z | u_0, \mu_2 \rangle = \frac{1}{2} (\mu_1 \mu_2 - 1) , \quad \langle u_0, \mu_1 | \sigma_y | u_0, \mu_2 \rangle = \frac{i}{2} (\mu_2 - \mu_1) . \quad (6.72)$$

Em contrapartida, sendo o acoplamento intrabanda $\langle u_0 | k_z | u_0 \rangle$ sempre nulo graças a hermiticidade de k_z herdada diretamente da componente p_z do operador momentum linear,

todos os elementos de matriz envolvendo esta quantidade são identicamente nulos, ou seja,

$$\langle u_0, \mu_1 | k_z \sigma_j | u_0, \mu_2 \rangle = 0 , \quad (6.73)$$

onde σ_j representa qualquer uma das três matrizes de Pauli. Substituindo (6.71), (6.72) e (6.73) na equação (6.70) e projetando em seguida os estados relativos ao processo de absorção de um fóton, temos

$$\begin{aligned} \langle u_0, \mu_1; 0_{\mathbf{q},\alpha} | W(t) | u_0, \mu_2; 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle = \frac{e}{\hbar c} \left\{ \mathbf{k}_{\parallel} \cdot \langle 0_{\mathbf{q},\alpha} | \mathbf{A} | 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle \left[\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (1 + \mu_1 \mu_2) + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} (\mu_1 + \mu_2) \right] - \frac{1}{2} \gamma_{1,12} \hat{z} \cdot \langle 0_{\mathbf{q},\alpha} | \mathbf{A} | 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle (\mu_1 \mu_2 - 1) k_{\parallel} \right\} . \quad (6.74) \end{aligned}$$

Por estarmos trabalhando no regime de aproximação de dipolo elétrico, não há troca de momento via o processo de transição óptica. Em outras palavras, estamos lidando com transições diretas onde o momento $\mathbf{k}_{\parallel}$ do gás de elétrons bidimensional se conserva. Neste contexto, a ação do potencial vetor nos estados de um fóton pode ser calculada facilmente,

$$\langle 0_{\mathbf{q},\alpha} | \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) | 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle \approx \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_q V}} e^{-i\omega_q t} . \quad (6.75)$$

Entretanto, como a transição óptica é calculada tomando $t = 0$, resultado naturalmente compatível com a equação (6.69), temos

$$\begin{aligned} \langle u_0, \mu_1; 0_{\mathbf{q},\alpha} | W(0) | u_0, \mu_2; 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle = \sqrt{\frac{\pi e^2}{2\hbar\omega_q V}} \left\{ 2 \left(\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha} \right) \left[\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (1 + \mu_1 \mu_2) + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} (\mu_1 + \mu_2) \right] - \left(\hat{z} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha} \right) (\mu_1 \mu_2 - 1) \gamma_{1,12} k_{\parallel} \right\} . \quad (6.76) \end{aligned}$$

Conhecendo o elemento de matriz do termo perturbativo, a probabilidade de transição por unidade de tempo pode ser então calculada a partir da equação (6.69),

$$\frac{P_{\mathbf{q}}^{\alpha}(t)}{t} = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar V \hbar \omega_q} \gamma_{1,12}^2 k_{\parallel}^2 \left| \hat{z} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha} \right|^2 \delta \left(\hbar \omega_q - (\mu_1 - \mu_2) \left(\beta_{00} + \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} k_{\parallel}^2 \right) \right) . \quad (6.77)$$

Vamos analisar a equação (6.77) no que diz respeito a direção de incidência do fóton na estrutura semicondutora. Como já sabido, o fóton se caracteriza por um vetor de onda $\mathbf{q}$ perpendicular ao plano definido pelos versores de polarização $\epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}$, onde $\alpha = 1, 2$. Caso o fóton incida no material semicondutor paralelamente ao eixo z de crescimento do

poço quântico, a probabilidade de transição será identicamente nula. Em outras palavras, o fóton deve ter ao menos um de seus versores de polarização ao longo do eixo z , o que descarta a possibilidade de transição óptica por *spin flip* no plano paralelo ao gás bidimensional de elétrons.

De todos os processos envolvidos na interação entre o fóton e o elétron de condução um dos casos mais simples é aquele que envolve as chamadas transições ressonantes, ou seja, onde a troca de energia no sistema elétron-fóton é igual a diferença de energia entre os dois estados possíveis que o elétron pode ocupar. Deixando mais claro, a energia $\hbar\omega_q$ transferida ao elétron é dada em termos do *splitting* devido a spin na relação de dispersão do modelo de uma subbanda,

$$\hbar\omega_q = E_{\mu_1}(k_{||}) - E_{\mu_2}(k_{||}) = (\mu_1 - \mu_2) \left(\beta_{00} + \frac{\hbar^2}{2M_{||}} k_{||}^2 \right). \quad (6.78)$$

Observe que $\hbar\omega_q$ é diferente de zero apenas na presença de *spin-flip*, ou seja, se houver mudança de orientação do grau de liberdade de spin. Este resultado é natural uma vez que, fixado um valor para o número quântico μ_2 , existe apenas uma alternativa de escolha para μ_1 . Escolhendo $\mu_2 = -\mu_1 = -\mu$ tal que a energia transferida ao elétron seja positiva, segue que

$$\hbar\omega_q = E_{\mu}(k_{||}) - E_{-\mu}(k_{||}) = 2\mu \left(\beta_{00} + \frac{\hbar^2}{2M_{||}} k_{||}^2 \right). \quad (6.79)$$

No intuito de eliminar o produto escalar na equação (6.77), vamos caracterizar a direção de incidência do fóton no material semiconductor através do ângulo φ entre o plano definido pelos versores de polarização do campo de radiação e o eixo z de crescimento do poço quântico. Em outras palavras, este resultado possui um caráter bem mais geral uma vez que independe de uma particular escolha do versor de polarização. A taxa de transição passa então a ser uma função dos parâmetros $k_{||}$ e φ dada por

$$\tau(k_{||}, \varphi) = \frac{2\pi^2 e^2}{\hbar V} \frac{\gamma_{1,12}^2}{\left(\beta_{00} + \frac{\hbar^2}{2M_{||}} k_{||}^2 \right)} k_{||}^2 \cos^2 \varphi. \quad (6.80)$$

Dado $k_{||}$ em torno da origem no espaço recíproco, ou seja, o ponto Γ na cela unitária, τ varia harmonicamente em função do ângulo de incidência φ do fóton modulada por um fator que depende dos parâmetros de Kane P_1 e P_2 , do gap E_g e do *split-off* do campo

cristalino Δ_c através do acoplamento β_{00} e ainda das massas efetivas $M_{||}$ e $\gamma_{1,12}$. Estes detalhes podem ser conferidos nas equações (3.38), (3.39) e (4.24), cuja análise revela ainda que a frequência de transição é totalmente insensível a variações no acoplamento spin-órbita Δ_{so} já que não depende dele. Note que $\varphi = \pi/2$ contempla o caso de incidência paralela ao eixo de crescimento do poço dado que a frequência de transição é identicamente nula. A taxa de transição também é igual a zero quando $k_{||} = 0$, independentemente de uma dada escolha do ângulo φ ,

$$\tau(0, \varphi) = 0. \quad (6.81)$$

Escolhendo $\varphi = n\pi$, onde $n \in \mathbb{Z}$, τ apresenta um valor máximo na coordenada angular,

$$\tau(k_{||}, n\pi) = \frac{2\pi^2 e^2}{\hbar V} \frac{\gamma_{1,12}^2}{\left(\beta_{00} + \frac{\hbar^2}{2M_{||}} k_{||}^2\right)} k_{||}^2. \quad (6.82)$$

6.4.2 Duas subbandas

Agora que compreendemos um pouco da física envolvida na interação elétron-fóton no modelo de uma subbanda, vamos estender o raciocínio da seção 6.4.1 calculando a taxa de transição óptica para o caso em que o poço quântico comporta duas subbandas, ou seja, os estados referentes aos dois primeiros níveis de energia do hamiltoniano H_d outrora discutidos no capítulo 4. Conforme mostramos na seção anterior, para calcular a probabilidade de transição por unidade de tempo devemos conhecer as energias e os autoestados do hamiltoniano efetivo $\widetilde{H}$ e os estados de um fóton que descrevem o processo de absorção. No que se refere ao hamiltoniano efetivo $\widetilde{H}$ na base de estados de duas subbandas, vimos no capítulo 4 que sua relação de dispersão tem a forma

$$E_{\lambda_1, \lambda_2}(k_{||}) = \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_{||}} + \epsilon_+ - \lambda_1 \beta_- + \lambda_2 \sqrt{|\eta_{01}|^2 k_{||}^2 + \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} + \beta_+ - \lambda_1 \epsilon_- \right)^2}, \quad (6.83)$$

onde o $\lambda_1 = \mp$ e $\lambda_2 = \pm$ representam números quânticos de spin e pseudo-spin, respectivamente. Vimos ainda que o conjunto de quatro estados do hamiltoniano $\widetilde{H}$ pode ser

generalizado numa única equação que depende da escolha dos números quânticos λ_1 e λ_2 ,

$$|k_{||}, \lambda_1, \lambda_2\rangle = \frac{1}{2} \{i\lambda_2 a_{\lambda_1 \lambda_2} |u_0\rangle \otimes (\lambda_1 |\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) + b_{\lambda_1 \lambda_2} |u_1\rangle \otimes (\lambda_1 |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)\} , \quad (6.84)$$

onde os coeficientes $a_{\lambda_1 \lambda_2}$ e $b_{\lambda_1 \lambda_2}$ são dados na equação (4.73). Em linhas gerais, esta expressão nos diz que há quatro estados disponíveis que podem ser populados pelo elétron de condução via a absorção de um fóton. Sendo mais preciso, se o elétron ocupa um estado com um par de números quânticos (λ_1, λ_2) definido, há três outros possíveis estados que podem ser ocupados via transições ópticas. Cada transição será então rotulada por um dos graus de liberdade do sistema, isto é, seja pela presença de *spin flip* ou pela mudança de paridade das autofunções do poço quântico. Quanto aos estados de um fóton, continuaremos utilizando o formalismo de números de ocupação inerente ao campo de radiação quantizado. Uma vez que os espaços vetoriais que compreendem os autoestados eletrônicos de $\widetilde{H}$ e os estados de fóton do potencial vetor são diferentes, o estado do sistema que descreve o acoplamento elétron-fóton pode ser escrito em termos do produto tensorial

$$|k_{||}, \lambda, \lambda'; 1_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle = |k_{||}, \lambda, \lambda'\rangle \otimes |1_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle . \quad (6.85)$$

A partir das equações (6.83), (6.84) e (6.85), estamos agora em condições de iniciar os cálculos que nos conduzirão às taxas de transição óptica deste sistema. No contexto da teoria de perturbação em primeira ordem, a probabilidade por unidade de tempo relativa a transição do elétron de condução entre os estados $|k_{||}, \lambda_3, \lambda_4\rangle$ e $|k_{||}, \lambda_1, \lambda_2\rangle$ via a absorção de um único fóton de momento $\mathbf{q}$, frequência ω_q e versor de polarização $\epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha$, $\alpha = 1, 2$, é dada pela *Regra de Ouro de Fermi* (16, 49, 63),

$$\frac{P_{\mathbf{q}}^\alpha(t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2; 0_{\mathbf{q}, \alpha} | W(0) | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4; 1_{\mathbf{q}, \alpha} \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_q + E_{\lambda_3, \lambda_4} - E_{\lambda_1, \lambda_2}) . \quad (6.86)$$

Uma vez que a base de estados (6.85) do sistema é separável, vamos calcular o elemento

de matriz de $W(t)$ projetando inicialmente os estados eletrônicos,

$$\begin{aligned} \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | W(t) | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = & \frac{2e}{\hbar c} \left\{ (\mathbf{k}_{||} \cdot \mathbf{A}) \left[\langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | \left(\frac{\hbar^2}{2m_{||}} \mathbb{1}_{2 \times 2} - \frac{\hbar^2}{2M_{||}} \sigma_x \right) | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle + \right. \right. \\ & - \frac{1}{2k_{||}} \gamma_{1,12} \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | k_z \sigma_z | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle \left. \right] - \frac{1}{2k_{||}} \gamma_{1,12} [\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{||} \times \mathbf{A})] \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | k_z \sigma_y | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle + \\ & + (\hat{z} \cdot \mathbf{A}) \left[\langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} k_z \mathbb{1}_{2 \times 2} - \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} k_z \sigma_x \right) | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle + \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{2} \gamma_{1,12} k_{||} \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | \sigma_z | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle \right] \right\} . \quad (6.87) \end{aligned}$$

O leitor atento perceberá logo que existem duas dificuldades distintas no que concerne ao cálculo dos elementos de matriz na base de estados do hamiltoniano efetivo $\widetilde{H}$. A primeira delas, talvez a mais simples, se refere a projeção destes estados nas matrizes de Pauli σ_j . Como pode ser visto na equação (6.84), como cada autoestado $|k_{||}, \lambda, \lambda'\rangle$ é plenamente separável nas autofunções $\{|u_0\rangle, |u_1\rangle\}$ do poço e nos estados de spin $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$, o cálculo desta projeção é mais imediato uma vez que as matrizes σ_j atuam apenas nos estados do espaço de spins. A outra dificuldade está diretamente relacionada aos termos que envolvem os produtos $k_z \sigma_j$ entre a componente k_z do vetor de onda, um operador, e qualquer uma das matrizes de Pauli. Este cálculo é um pouco mais delicado pois k_z atua de maneira não-trivial no conjunto de autofunções $\{|u_0\rangle, |u_1\rangle\}$ do poço quântico. Em virtude do espaço ocupado pelos resultados, desenvolvemos em detalhes no apêndice D o cálculo de cada elemento de matriz. Assim, substituindo (D.11)–(D.13) e (D.21)–(D.24)

na equação (6.87), temos a nova expressão

$$\begin{aligned}
\langle k_{\parallel}, \lambda_1, \lambda_2 | W(t) | k_{\parallel}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = & \frac{e}{2\hbar c} \left\{ (\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{A}) \left[\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (1 + \lambda_1 \lambda_3) (b_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} + \right. \right. \\
& + \lambda_2 \lambda_4 a_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) - \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} (\lambda_1 + \lambda_3) (b_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} - \lambda_2 \lambda_4 a_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) + \\
& \left. \left. + \frac{1}{2k_{\parallel}} |\eta_{01}| (1 + \lambda_1 \lambda_3) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} + \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) \right] + \right. \\
& + (\hat{z} \cdot \mathbf{A}) \left[\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} (1 - \lambda_1 \lambda_3) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} + \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| + \right. \\
& + \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} (\lambda_1 - \lambda_3) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} - \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| + \\
& \left. \left. + \frac{1}{2} \gamma_{1,12} k_{\parallel} (1 - \lambda_1 \lambda_3) (b_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} + \lambda_2 \lambda_4 a_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) \right] + \right. \\
& \left. - i \frac{1}{2k_{\parallel}} |\eta_{01}| [\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{\parallel} \times \mathbf{A})] (\lambda_1 + \lambda_3) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} - \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) \right\} . \quad (6.88)
\end{aligned}$$

Dentre outros aspectos na equação (6.88), é notável a presença do acoplamento dependente de spin $|\eta_{01}|$ dado em (4.29). Continuar os cálculos sem sequer fazer algumas definições que simplifiquem ou pelo menos reduzam o tamanho da equação anterior é totalmente inviável. No intuito de não suprimir a dependência explícita nos números quânticos de spin (λ_1, λ_3) e pseudo-spin (λ_2, λ_4) , vamos definir quatro parâmetros escritos em termos de combinações lineares dos coeficientes $a_{\lambda_1 \lambda_2}$ e $b_{\lambda_1 \lambda_2}$ dados na equação (4.73), a saber,

$$\mathcal{Q}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} = b_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} + \lambda_2 \lambda_4 a_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4} , \quad \mathcal{R}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} = b_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} - \lambda_2 \lambda_4 a_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4} , \quad (6.89)$$

$$\mathcal{S}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} = \lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} + \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4} , \quad \mathcal{T}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} = \lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} - \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4} . \quad (6.90)$$

Resta agora projetar os estados de um fóton $|1_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle$ e $|0_{\mathbf{q}, \alpha}\rangle$ que descrevem o processo de absorção na interação do elétron com o campo de radiação e substituir as definições em (6.89)-(6.90) diretamente na equação (6.88). Tendo em vista que estamos tratando apenas do caso de transições diretas, ou seja, transições onde o vetor de onda $\mathbf{k}_{\parallel}$ do gás

bidimensional de elétrons se conserva (43,49), temos

$$\begin{aligned}
& \langle k_{\parallel}, \lambda_1, \lambda_2; 0_{\mathbf{q},\alpha} | W(t) | k_{\parallel}, \lambda_3, \lambda_4; 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle = \\
& = \frac{e}{2\hbar c} (\hat{z} \cdot \langle 0_{\mathbf{q},\alpha} | \mathbf{A} | 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle) \left\{ (1 - \lambda_1 \lambda_3) \left[\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| \mathcal{S}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} + \gamma_{1,12} \frac{k_{\parallel}}{2} \mathcal{Q}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} \right] + \right. \\
& + (\lambda_1 - \lambda_3) \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| \mathcal{T}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} \left. \right\} - i \frac{e}{2\hbar c} [\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{\parallel} \times \langle 0_{\mathbf{q},\alpha} | \mathbf{A} | 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle)] (\lambda_1 + \lambda_3) \frac{|\eta_{01}|}{2k_{\parallel}} \mathcal{T}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} + \\
& - \frac{e}{2\hbar c} (\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \langle 0_{\mathbf{q},\alpha} | \mathbf{A} | 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle) \left\{ (\lambda_1 + \lambda_3) \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} \mathcal{R}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} - (1 + \lambda_1 \lambda_3) \left[\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \mathcal{Q}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} + \frac{|\eta_{01}|}{2k_{\parallel}} \mathcal{S}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{6.91}$$

Como estamos trabalhando no regime de aproximação de dipolo elétrico, ou seja, supondo o comprimento da onda do feixe luminoso incidente na heteroestrutura muito maior que a região de confinamento do elétron de condução, o elemento de matriz do potencial vetor relativo ao processo de absorção do fóton independe da coordenada $\mathbf{r}$,

$$\langle 0_{\mathbf{q},\alpha} | \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) | 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle \approx \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_q V}} e^{-i\omega_q t}. \tag{6.92}$$

Vamos então substituir esta aproximação na equação (6.91) lembrando que o elemento de matriz da perturbação $W(t)$ na taxa de transição óptica é calculado no instante $t = 0$,

$$\begin{aligned}
& \langle k_{\parallel}, \lambda_1, \lambda_2; 0_{\mathbf{q},\alpha} | W(0) | k_{\parallel}, \lambda_3, \lambda_4; 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle = \\
& = \frac{A_0}{\sqrt{\omega_q}} (\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}) \left\{ (1 + \lambda_1 \lambda_3) \left[\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \mathcal{Q}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} + \frac{|\eta_{01}|}{2k_{\parallel}} \mathcal{S}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} \right] - (\lambda_1 + \lambda_3) \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} \mathcal{R}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} \right\} + \\
& + \frac{A_0}{\sqrt{\omega_q}} (\hat{z} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}) \left\{ (1 - \lambda_1 \lambda_3) \left[\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| \mathcal{S}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} + \gamma_{1,12} \frac{k_{\parallel}}{2} \mathcal{Q}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} \right] + \right. \\
& + (\lambda_1 - \lambda_3) \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| \mathcal{T}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} \left. \right\} - i \frac{A_0}{\sqrt{\omega_q}} [\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{\parallel} \times \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha})] (\lambda_1 + \lambda_3) \frac{|\eta_{01}|}{2k_{\parallel}} \mathcal{T}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2}, \tag{6.93}
\end{aligned}$$

onde a constante A_0 é

$$A_0 = \sqrt{\frac{\pi e^2}{2\hbar V}}. \tag{6.94}$$

A equação (6.93) ainda é passível de algumas simplificações se introduzirmos as definições

$$\mathcal{C}_1 = \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}}, \quad \mathcal{C}_2 = \frac{|\eta_{01}|}{2}, \quad \mathcal{C}_3 = \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}}, \quad \mathcal{C}_4 = \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle|, \tag{6.95}$$

$$\mathcal{C}_5 = \frac{1}{2} \gamma_{1,12}, \quad \mathcal{C}_6 = \frac{\hbar^2}{2M_{\perp}} |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle|. \tag{6.96}$$

Observe que cada elemento possui dependências muito particulares em função das massas efetivas $m_{||}$, $m_{\perp}$, $M_{||}$, $M_{\perp}$ e $\gamma_{1,12}$ do sistema e ainda do acoplamento dependente de spin $|\eta_{01}|$. A título de curiosidade, as constantes $\mathcal{C}_1$, $\mathcal{C}_3$ e $\mathcal{C}_5$ possuem dimensão de energia vezes comprimento ao quadrado. Diferentemente, $\mathcal{C}_2$, $\mathcal{C}_4$ e $\mathcal{C}_6$ têm dimensão de energia vezes comprimento. Assim, substituindo estas definições no elemento de matriz na equação (6.93), encontramos a forma geral

$$\begin{aligned} \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2; 0_{\mathbf{q},\alpha} | W(0) | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4; 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle = & \frac{A_0}{k_{||}\sqrt{\omega_q}} (\mathbf{k}_{||} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}) \left\{ (1 + \lambda_1 \lambda_3) \left[\mathcal{C}_1 k_{||} \mathcal{Q}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \mathcal{C}_2 \mathcal{S}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} \right] - (\lambda_1 + \lambda_3) \mathcal{C}_3 k_{||} \mathcal{R}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} \right\} - i \frac{A_0}{k_{||}\sqrt{\omega_q}} \left[\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{||} \times \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}) \right] (\lambda_1 + \lambda_3) \mathcal{C}_2 \mathcal{T}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} + \\ & + \frac{A_0}{\sqrt{\omega_q}} (\hat{z} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}) \left\{ (1 - \lambda_1 \lambda_3) \left[\mathcal{C}_4 \mathcal{S}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} + \mathcal{C}_5 k_{||} \mathcal{Q}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} \right] + (\lambda_1 - \lambda_3) \mathcal{C}_6 \mathcal{T}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\lambda_1, \lambda_2} \right\} . \quad (6.97) \end{aligned}$$

Esta equação guarda toda a essência da transição óptica no que se refere ao modelo de duas subbandas por apresentar contribuições diretamente ligadas a direção da luz incidente na heteroestrutura semicondutora. Em particular, a presença do termo $\mathbf{k}_{||} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}$ está associada a chamada transição óptica *in plane*, ou seja, transições no plano perpendicular a direção z de crescimento do poço quântico. Por outro lado, o termo $\hat{z} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}$ é responsável por transições ópticas devidas a incidência do fóton na direção paralela a este mesmo eixo. A presença ou não destes termos na expressão para a taxa de transição depende da escolha dos versores de polarização $\epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}$. Outro aspecto importante a se ressaltar se refere aos números quânticos de spin (λ_1, λ_3) e pseudo-spin (λ_2, λ_4) . Através de escolhas particulares para estes índices, podemos selecionar também qual das transições comentadas contribui efetivamente para a taxa de transição. Considerando diferentes paridades das autofunções do poço quântico simétrico, estudaremos nas seções 6.4.2 e 6.4.2 os casos onde o *spin flip* está ausente e presente, respectivamente.

Antes, porém, por estarmos livres para escolher a forma dos versores de polarização $\epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}$, vamos tratar de um caso onde é possível ter contribuições para a taxa de transição devido a incidência do fóton *in plane* e na direção paralela ao eixo z de crescimento do poço quântico simétrico. Seja o plano formado pelos versores $\epsilon_{\mathbf{q}}^1$ e $\epsilon_{\mathbf{q}}^2$ do campo de radiação associado ao feixe de luz incidente na heteroestrutura. Agora imagine que este plano

forme um ângulo φ com o eixo z de crescimento do poço. Uma vez que o vetor de onda $\mathbf{k}_{||}$ está definido no plano xy do gás bidimensional de elétrons, o ângulo entre este vetor e o plano dos versores de polarização é dado por $\pi/2 - \varphi$. Assim,

$$\hat{z} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha} = \cos \varphi, \quad \mathbf{k}_{||} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha} = k_{||} \sin \varphi, \quad \hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{||} \times \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}) = k_{||} \sin \varphi. \quad (6.98)$$

Adianto ao leitor que esta parametrização será recorrente em ambas seções 6.4.2 e 6.4.2. Entretanto, não vamos substituí-la diretamente na equação (6.97) pois queremos saber quais produtos envolvendo $\mathbf{k}_{||}$, $\epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}$ e $\hat{z}$ sobrevivem frente a escolhas dos números quânticos de spin e pseudo-spin.

Poço quântico simétrico: ausência de *spin flip*

Considerando diferentes paridades das autofunções do poço quântico simétrico e não havendo *spin flip*, ou seja, tomando os casos $\lambda_2 = +$ e $\lambda_4 = -$ e $\lambda_1 = \lambda_3 = \mu$, respectivamente, o elemento de matriz da perturbação $W(t)$ dado na equação (6.97) é imediatamente reduzido na expressão

$$\begin{aligned} \langle k_{||}, \mu, +; 0_{\mathbf{q}, \alpha} | W(0) | k_{||}, \mu, -; 1_{\mathbf{q}, \alpha} \rangle = & \frac{2A_0}{k_{||}\sqrt{\omega_q}} (\mathbf{k}_{||} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}) \left\{ \mathcal{C}_1 k_{||} \mathcal{Q}_{\mu, -}^{\mu, +} + \mathcal{C}_2 \mathcal{S}_{\mu, -}^{\mu, +} - \mu \mathcal{C}_3 k_{||} \mathcal{R}_{\mu, -}^{\mu, +} \right\} + \\ & - i \frac{2\mu A_0}{k_{||}\sqrt{\omega_q}} \left[\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{||} \times \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}) \right] \mathcal{C}_2 \mathcal{T}_{\mu, -}^{\mu, +}. \end{aligned} \quad (6.99)$$

Analisando os termos $\mathbf{k}_{||} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}$ e $\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{||} \times \epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha})$, a taxa de transição será não-nula desde que o plano definido pelos versores de polarização $\epsilon_{\mathbf{q}}^{\alpha}$ do fóton seja paralelo ao vetor de onda $\mathbf{k}_{||}$ no plano do gás bidimensional de elétrons, ou seja, a incidência do fóton deve ser paralela ao eixo z . Esta condição caracteriza a transição *in plane* na ausência de *spin flip*. Partindo da definição dos parâmetros $a_{\lambda_1 \lambda_2}$ e $b_{\lambda_1 \lambda_2}$ dados na equação (4.73) e dos coeficientes $\mathcal{Q}$, $\mathcal{R}$, $\mathcal{S}$ e $\mathcal{T}$ apresentados nas equações (6.89) e (6.90), as seguintes relações

podem ser facilmente demonstradas

$$\mathcal{Q}_{\mu,-}^{\mu,+} = a_{\mu,+}a_{\mu,-} - b_{\mu,+}b_{\mu,-} = 0 , \quad (6.100)$$

$$\mathcal{T}_{\mu,-}^{\mu,+} = a_{\mu,+}b_{\mu,-} + b_{\mu,+}a_{\mu,-} = 2 , \quad (6.101)$$

$$\mathcal{S}_{\mu,-}^{\mu,+} = a_{\mu,+}b_{\mu,-} - b_{\mu,+}a_{\mu,-} = -2 \frac{\Omega_{\mu}(0)}{\Omega_{\mu}(\eta_{01})} , \quad (6.102)$$

$$\mathcal{R}_{\mu,-}^{\mu,+} = a_{\mu,+}a_{\mu,-} + b_{\mu,+}b_{\mu,-} = 2 \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{\mu}(0)}{\Omega_{\mu}(\eta_{01})} \right]^2} . \quad (6.103)$$

Ao inserir (6.98) e (6.100)–(6.103) na equação (6.99), após algumas simplificações encontramos o resultado

$$\begin{aligned} \langle k_{||}, \mu, +; 0_{\mathbf{q},\alpha} | W(0) | k_{||}, \mu, -; 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle = & -i \frac{4\mu A_0}{\sqrt{\omega_q}} \mathcal{C}_2 \sin \varphi + \\ & - \frac{4A_0}{\sqrt{\omega_q}} \sin \varphi \left\{ \mu \mathcal{C}_3 k_{||} \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{\mu}(0)}{\Omega_{\mu}(\eta_{01})} \right]^2} + \mathcal{C}_2 \frac{\Omega_{\mu}(0)}{\Omega_{\mu}(\eta_{01})} \right\} . \end{aligned} \quad (6.104)$$

Para calcular a probabilidade de transição por unidade de tempo nas condições que especificamos para os números quânticos de spin e pseudo-spin, basta agora utilizar a equação (6.86) tendo em vista que $\lambda_1 = \lambda_3 = \mu$, $\lambda_2 = +$ e $\lambda_4 = -$. Assim, de posse da equação (6.104), segue imediatamente que

$$\begin{aligned} \frac{P_{\mathbf{q}}^{\alpha}(t)}{t} = & \frac{16\pi^2 e^2}{\hbar V \hbar \omega_q} \frac{|\eta_{01}|^2}{\Omega_{\mu}^2(\eta_{01})} \sin^2 \varphi \left\{ (3 + 2\mu) \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} \right)^2 + (\beta_+ - \mu \epsilon_-)^2 + \right. \\ & \left. + 2 \left[\frac{|\eta_{01}|^2}{4} + \frac{\hbar^2}{2M_{||}} (1 + \mu) (\beta_+ - \mu \epsilon_-) \right] k_{||}^2 \right\} \delta(\hbar \omega_q - 2\Omega_{\mu}(\eta_{01})) . \end{aligned} \quad (6.105)$$

Cabe lembrar ao leitor que nosso estudo é direcionado para transições ressonantes, ou seja, a classe de transições onde a energia transferida ao elétron pelo fóton é igual ao *splitting* na relação de dispersão do hamiltoniano $\widetilde{H}$. Como aqui o *splitting* é devido à mudança de paridade das subbandas do poço quântico simétrico, então

$$\hbar \omega_q = E_{\mu,+}(k_{||}) - E_{\mu,-}(k_{||}) = 2 \sqrt{|\eta_{01}|^2 k_{||}^2 + \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} + \beta_+ - \mu \epsilon_- \right)^2} = 2\Omega_{\mu}(\eta_{01}) . \quad (6.106)$$

Este vínculo na energia do fóton pode simplificar drasticamente a equação (6.105) visto que é uma função da componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano. Como a taxa de transição depende dos coeficientes $\mathcal{C}_2$ e $\mathcal{C}_3$, é interessante do ponto de vista algébrico substituir

juntamente com a equação (6.106) as expressões para estes respectivos parâmetros dadas em (6.95). Como os cálculos são razoavelmente simples, encontramos o resultado final

$$\tau(k_{||}, \varphi) = \frac{8\pi^2 e^2}{\hbar V} \frac{|\eta_{01}|^2}{\Omega_\mu^3(\eta_{01})} \left\{ (3 + 2\mu) \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} \right)^2 + (\beta_+ - \mu\epsilon_-)^2 + \right. \\ \left. + 2 \left[\frac{|\eta_{01}|^2}{4} + \frac{\hbar^2}{2M_{||}} (1 + \mu) (\beta_+ - \mu\epsilon_-) \right] k_{||}^2 \right\} \sin^2 \varphi. \quad (6.107)$$

Observe que esta equação é diretamente proporcional ao quadrado do acoplamento dependente de spin $|\eta_{01}|$. Se por algum motivo este acoplamento se anular, então a probabilidade de transição por unidade de tempo também se anula igualmente. Como seria razoável esperar, a equação (6.107) é função de quantidades ligadas diretamente ao poço quântico simétrico como, por exemplo, o acoplamento β_+ e a energia ϵ_- . Outra característica inerente a este resultado é que depende apenas do gap E_g e do *split-off* do campo cristalino Δ_c , não variando com o acoplamento spin órbita Δ_{so} . Isto pode ser constatado analisando a definição da massa efetiva $M_{||}$, dos acoplamentos $|\eta_{01}|$ e β_+ , e ainda da função $\Omega_\mu(\eta_{01})$ nas equações (3.38), (4.29), (4.54) e (4.66), respectivamente. Quanto ao ângulo de incidência do fóton na heteroestrutura, a taxa de transição possui um valor máximo sempre que a condição $\varphi = (n + 1/2)\pi$ é obedecida, onde $n \in \mathbb{Z}$.

Poço quântico simétrico: presença de *spin flip*

Concluindo o estudo das transições ópticas na heteroestrutura analisaremos o caso contrário àquele discutido na seção 6.4.2, ou seja, permitiremos a mudança na orientação de spin associada a paridades arbitrárias das autofunções do poço quântico simétrico. Em outras palavras, escolhemos os números quânticos de spin $\lambda_1 = +$ e $\lambda_3 = -$ e os números quânticos de pseudo-spin $\lambda_2 = \mu$ e $\lambda_4 = \mu'$ diretamente no elemento de matriz da perturbação $W(t)$ dada na equação (6.97), a saber,

$$\langle k_{||}, +, \mu; 0_{\mathbf{q}, \alpha} | W(0) | k_{||}, -, \mu'; 1_{\mathbf{q}, \alpha} \rangle = \frac{2A_0}{\sqrt{\omega_q}} (\hat{z} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha) \left\{ C_4 S_{-, \mu'}^{+, \mu} + C_5 k_{||} Q_{-, \mu'}^{+, \mu} + C_6 T_{-, \mu'}^{+, \mu} \right\}. \quad (6.108)$$

Observe que caso o fóton incida na heteroestrutura semicondutora paralelamente ao eixo z de crescimento do poço quântico simétrico a taxa de transição relativa ao elemento de matriz na equação (6.108) é zero. Deixando mais claro, este resultado implica diretamente que não é possível haver transições ópticas devido *spin flip* no plano do gás bidimensional de elétrons. Assim, substituindo (6.94), (6.98) e (6.108) na equação (6.86), a probabilidade de transição por unidade de tempo para o caso em que $\lambda_1 = +$, $\lambda_2 = \mu$, $\lambda_3 = -$ e $\lambda_4 = \mu'$ é

$$\frac{P_{\mathbf{q}}^{\alpha}(t)}{t} = \frac{8\pi^2 e^2}{\hbar V \hbar \omega_q} \cos^2 \varphi \left(\mathcal{C}_4 \mathcal{S}_{-,\mu'}^{+,\mu} + \mathcal{C}_5 k_{||} \mathcal{Q}_{-,\mu'}^{+,\mu} + \mathcal{C}_6 \mathcal{T}_{-,\mu'}^{+,\mu} \right)^2 \delta(\hbar \omega_q + E_{-,\mu'} - E_{+,\mu}) . \quad (6.109)$$

Os parâmetros $\mathcal{Q}$, $\mathcal{S}$ e $\mathcal{T}$ são dados nas equações (6.89) e (6.90). Para concluir o cálculo da taxa de transição, nossa próxima tarefa vai se resumir no tratamento algébrico da soma de quadrados presente na equação (6.109). As expressões que aparecem destas simplificações são em geral extensas e desenvolvemos todos estes cálculos na seção final do apêndice D.

A probabilidade de transição pode ser então reescrita utilizando a equação (D.38),

$$\begin{aligned} \frac{P_{\mathbf{q}}^{\alpha}(t)}{t} = & \frac{8\pi^2 e^2}{\hbar V \hbar \omega_q} \cos^2 \varphi \left\{ \left(\mathcal{C}_4^2 + \mathcal{C}_5^2 k_{||}^2 + \mathcal{C}_6^2 \right) + \right. \\ & - \frac{\mu \mu'}{\Omega_+ (\eta_{01}) \Omega_- (\eta_{01})} \left[\left(\mathcal{C}_4^2 + \mathcal{C}_5^2 k_{||}^2 - \mathcal{C}_6^2 \right) \left[\left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} + \beta_+ \right)^2 - \epsilon_-^2 \right] + |\eta_{01}|^2 k_{||}^2 \left(\mathcal{C}_4^2 - \mathcal{C}_5^2 k_{||}^2 - \mathcal{C}_6^2 \right) + \right. \\ & - 2\mathcal{C}_5 \mathcal{C}_6 |\eta_{01}| k_{||}^2 \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} + \beta_+ \right) \left. \right] + \frac{2\mathcal{C}_4 \mathcal{C}_6}{\Omega_+ (\eta_{01}) \Omega_- (\eta_{01})} \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} + \beta_+ \right) [\mu' \Omega_+ (\eta_{01}) - \mu \Omega_- (\eta_{01})] + \\ & + \frac{2\mathcal{C}_4}{\Omega_+ (\eta_{01}) \Omega_- (\eta_{01})} \left(\mathcal{C}_6 \epsilon_- + \mathcal{C}_5 |\eta_{01}| k_{||}^2 \right) [\mu' \Omega_+ (\eta_{01}) + \\ & \left. + \mu \Omega_- (\eta_{01}) \right] \left. \right\} \delta(\hbar \omega_q - [\mu \Omega_- (\eta_{01}) - \mu' \Omega_+ (\eta_{01}) - 2\beta_-]) . \quad (6.110) \end{aligned}$$

Como já mencionado em outros contextos, estamos tratando apenas de transições ressonantes onde a energia $\hbar \omega_q$ que o fóton cede ao elétron é igual a diferença de energia entre os níveis final e inicial ocupados pelo elétron no processo de absorção. Como o *splitting* na relação de dispersão é devido aqui a spin e a arbitrariedade na escolha da paridade dos autoestados do poço quântico simétrico, então

$$\hbar \omega_q = E_{+,\mu}(k_{||}) - E_{-,\mu'}(k_{||}) = \mu \Omega_- (\eta_{01}) - \mu' \Omega_+ (\eta_{01}) - 2\beta_- . \quad (6.111)$$

A energia do fóton depende diretamente da componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano através da função $\Omega_\lambda(\eta_{01})$ dada na equação (4.66). É natural, portanto, substituir este resultado na probabilidade de transição por unidade de tempo e tentar fazer algumas simplificações. Entretanto, o leitor deve ter percebido que estamos lidando com expressões um pouco intrincadas que misturam termos lineares e não-lineares na forma de raízes quadradas. Por hora, o máximo que podemos fazer é substituir (6.111) na equação (6.110) e analisar o resultado obtido,

$$\begin{aligned} \tau(k_{||}, \varphi) = & \frac{8\pi^2 e^2}{\hbar V [\mu\Omega_-(\eta_{01}) - \mu'\Omega_+(\eta_{01}) - 2\beta_-]} \left\{ (\mathcal{C}_4^2 + \mathcal{C}_5^2 k_{||}^2 + \mathcal{C}_6^2) + \right. \\ & - \frac{\mu\mu'}{\Omega_+(\eta_{01})\Omega_-(\eta_{01})} \left[(\mathcal{C}_4^2 + \mathcal{C}_5^2 k_{||}^2 - \mathcal{C}_6^2) \left[\left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} + \beta_+ \right)^2 - \epsilon_-^2 \right] + |\eta_{01}|^2 k_{||}^2 (\mathcal{C}_4^2 - \mathcal{C}_5^2 k_{||}^2 - \mathcal{C}_6^2) + \right. \\ & - 2\mathcal{C}_5\mathcal{C}_6 |\eta_{01}| k_{||}^2 \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} + \beta_+ \right) \left. \right] + \frac{2\mathcal{C}_4\mathcal{C}_6}{\Omega_+(\eta_{01})\Omega_-(\eta_{01})} \left(\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} + \beta_+ \right) [\mu'\Omega_+(\eta_{01}) - \mu\Omega_-(\eta_{01})] + \\ & \left. + \frac{2\mathcal{C}_4}{\Omega_+(\eta_{01})\Omega_-(\eta_{01})} (\mathcal{C}_6\epsilon_- + \mathcal{C}_5|\eta_{01}|k_{||}^2) [\mu'\Omega_+(\eta_{01}) + \mu\Omega_-(\eta_{01})] \right\} \cos^2 \varphi. \quad (6.112) \end{aligned}$$

Diferentemente do resultado obtido na seção 6.4.2, a dependência angular da taxa de transição na presença *spin flip* é dada pela função cosseno. Este aspecto pode ser entendido através da direção de incidência do fóton na heteroestrutura: se compararmos as equações (6.99) e (6.108), a taxa de transição é nula na presença de *spin flip* caso o fóton incida paralelamente ao eixo z de crescimento do poço quântico simétrico, ou seja, não pode haver transições ópticas devido a *spin flip* no plano do gás bidimensional de elétrons. Ademais, a taxa de transição tem um máximo se o fóton incide no semiconductor sob um ângulo $\varphi = n\pi$, onde $n \in \mathbb{Z}$. A dependência na coordenada do vetor de onda $k_{||}$ no plano não é tão simples uma vez que $\Omega_\lambda(\eta_{01})$ também é função desta variável através de uma soma de termos inserida numa raiz quadrada. Contrariamente ao que percebemos na seção 6.4.2, aqui a probabilidade de transição por unidade de tempo varia com o acoplamento spin-órbita Δ_{so} através da massa efetiva $m_\perp$ presente no coeficiente $\mathcal{C}_4$ definido em (6.95). Isto pode ser constatado facilmente através da equação (3.37).

Como seria de esperar, a taxa de transição em (6.112) recobra o resultado obtido para a probabilidade por unidade de tempo da absorção de um fóton pelo elétron de condução dada em (6.80) no modelo de uma subbanda se tomarmos alguns limites. Para tanto,

além de impor a condição $\mu = \mu'$ que contempla o caso de uma subbanda, o acoplamento dependente de spin $|\eta_{01}|$ deve ser nulo tendo em vista que o poço quântico comporta apenas um estado ligado. Através das equações (6.95)–(6.96), estas escolhas levam a $\mathcal{C}_2 = \mathcal{C}_4 = \mathcal{C}_6 = 0$. Além disso, dadas as equações (4.52) e (4.54), a passagem de duas para uma subbanda significa fazer $\epsilon_+ \rightarrow \mathcal{E}_0$, $\epsilon_- \rightarrow 0$, $\beta_+ \rightarrow \beta_{00}$ e $\beta_- \rightarrow 0$ tal que

$$\Omega_{\pm}(0) = \mp \left(\beta_{00} + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2M_{||}} \right). \quad (6.113)$$

Sendo $\mathcal{C}_5 = \gamma_{1,12}/2$, fazendo todas as substituições comentadas no parágrafo anterior mostramos, finalmente, que a taxa de transição óptica do modelo de duas subbandas na presença de *spin flip* recobra o resultado encontrado para uma subbanda,

$$\tau(k_{||}, \varphi) = \frac{2\pi^2 e^2}{\hbar V} \frac{\gamma_{1,12}^2}{\left(\beta_{00} + \frac{\hbar^2}{2M_{||}} k_{||}^2 \right)} k_{||}^2 \cos^2 \varphi. \quad (6.114)$$

6.5 Monoestruturas

Vamos encerrar este capítulo calculando as taxas de transição óptica relativas a absorção de um único fóton por um elétron de condução numa monoestrutura semicondutora. Diferentemente das seções 6.4.1 e 6.4.2, aqui vamos nos limitar a parametrização cúbica onde $\vartheta = 0$, ou seja, $\tilde{P}_1 = 0$ e $\bar{P}_1 = P_1$. Em outras palavras, como o bloco H_v da matriz de Kane é puramente diagonal nesta parametrização, não haverá nenhum tipo de correção em segunda ordem no inverso do gap de energia no hamiltoniano efetivo que inclui a interação elétron-fóton para o semicondutor na fase *bulk*. Muito embora este procedimento esteja em contraste com as seções 3.3 e 4.3 onde estas contribuições em segunda ordem levaram a presença de uma interação spin-órbita de Rashba na equação efetiva, a presença de termos deste tipo na perturbação $W(t)$ que descreve a interação elétron-fóton apenas complicaria os resultados a um nível desnecessário para a adequada interpretação física.

Para calcular a taxa de transição óptica relativa a absorção de um fóton de momento $\mathbf{q}$ e polarização α , devemos conhecer as energias e autoestados do elétron presente no sistema, além dos estados de fóton e do hamiltoniano $W(t)$ que caracteriza a interação elétron-fóton. Começando pelas propriedades eletrônicas, uma vez que na parametrização cúbica o ângulo $\vartheta = 0$ torna os coeficientes $\mathbf{a}_6$ e $\mathbf{a}_7$ identicamente nulos, a relação de dispersão do hamiltoniano efetivo $\widetilde{H}$ que descreve o elétron na banda de condução do semicondutor na fase *bulk* é imediatamente reescrita como

$$E_\mu(k_{||}, k_z) = \mathbf{a}_1 k_{||}^2 + \mathbf{a}_2 k_z^2 + \mu \sqrt{(\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2)^2 + \mathbf{a}_5^2 k_{||}^2 k_z^2}, \quad (6.115)$$

onde o número quântico $\mu = \pm$ representa a multiplicidade do espectro frente ao grau de liberdade de spin. Este resultado pode ser verificado consultando a equação (4.81). Ainda segundo a seção 4.3, discutimos que a relação $\mathbf{a}_6 = \mathbf{a}_7 = 0$ especifica o ângulo Φ presente nos estados eletrônicos de $\widetilde{H}$ como um múltiplo inteiro de π . Deixando mais claro, ao tomar o caso em que $\Phi = n\pi$ na equação (4.90), $n \in \mathbb{Z}$, os autoestados do hamiltoniano efetivo se simplificam na equação

$$|\psi_\mu\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \mu \frac{\mathbf{a}_5 k_{||} k_z}{\Gamma}} (|\uparrow\rangle + \mu |\downarrow\rangle), \quad (6.116)$$

onde Γ é função das massas efetivas e das coordenadas $k_{||}$ e k_z do vetor de onda,

$$\Gamma(k_{||}, k_z) = \sqrt{(\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2)^2 + \mathbf{a}_5^2 k_{||}^2 k_z^2}. \quad (6.117)$$

Lembrando que na monoestrutura as componentes do vetor de onda se comportam como números e o potencial estrutural do poço quântico é identicamente nulo visto que não há confinamento eletrônico devido a nenhum tipo de junção semicondutora, o hamiltoniano que descreve a interação entre o elétron de condução e o campo de radiação é dado pela equação (6.41),

$$W(t) = \frac{e}{\hbar c} \left\{ \frac{1}{k_{||}} (2\mathbf{a}_1 k_{||} \mathbf{1}_{2 \times 2} - 2\mathbf{a}_3 k_{||} \sigma_x - \mathbf{a}_5 k_z \sigma_z) (\mathbf{A} \cdot \mathbf{k}_{||}) - \mathbf{a}_5 \frac{k_z}{k_{||}} [\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{||} \times \mathbf{A})] \sigma_y + \right. \\ \left. + (2\mathbf{a}_2 k_z \mathbf{1}_{2 \times 2} - 2\mathbf{a}_4 k_z \sigma_x - \mathbf{a}_5 k_{||} \sigma_z) (\hat{z} \cdot \mathbf{A}) \right\}, \quad (6.118)$$

onde utilizamos a mesma definição para as massas efetivas que aquela adotada na equação

(3.43). Os estados $|\psi_\mu\rangle$ do hamiltoniano $\widetilde{H}$ estarão sujeitos apenas a ação das matrizes de Pauli no cálculo da probabilidade de transição por unidade de tempo. Assim, a equação (6.118) está escrita de uma maneira que tornará esta tarefa bem mais simples.

Recorrendo à teoria de perturbação dependente do tempo em primeira ordem, a *Regra de Ouro de Fermi* nos diz que a probabilidade de transição por unidade de tempo relativa a absorção de um fóton de momento $\mathbf{q}$, frequência ω_q e polarização α é (63)

$$\frac{P_{\mathbf{q}}^\alpha(t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{\mu_1}; 0_{\mathbf{q},\alpha} | W(0) | \psi_{\mu_2}, 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_q + E_{\mu_2} - E_{\mu_1}) . \quad (6.119)$$

O leitor perceberá que os cálculos desenvolvidos aqui serão similares àqueles na seção 6.4.1 para o caso de uma subbanda. A diferença exclusiva entre os tratamentos está no vetor de onda: enquanto aqui se comporta como um número, naquela seção representava um operador diferencial. Por pertencerem a espaços vetoriais distintos, o estado $|\psi_\mu, 1_{\mathbf{q},\alpha}\rangle$ se decompõe no produto direto entre os estados eletrônico $|\psi_\mu\rangle$ e de um fóton $|1_{\mathbf{q},\alpha}\rangle$, ou seja, $|\psi_\mu, 1_{\mathbf{q},\alpha}\rangle = |\psi_\mu\rangle \otimes |1_{\mathbf{q},\alpha}\rangle$, o que permite calcular o elemento de matriz do hamiltoniano $W(t)$ separadamente, ou seja, primeiro projetaremos apenas os autoestados do hamiltoniano $\widetilde{H}$ e, em seguida, decorre o tratamento dos estados do campo de radiação relativos a presença de um fóton. Começando pelos estados eletrônicos, a ação das matrizes de Pauli resulta no conjunto de equações

$$\langle \psi_{\mu_1} | \mathbf{1}_{2 \times 2} | \psi_{\mu_2} \rangle = \frac{1}{2} \mathbf{u}_{\mu_1, \mu_2} (1 + \mu_1 \mu_2) , \quad \langle \psi_{\mu_1} | \sigma_x | \psi_{\mu_2} \rangle = \frac{1}{2} \mathbf{u}_{\mu_1, \mu_2} (\mu_1 + \mu_2) , \quad (6.120)$$

$$\langle \psi_{\mu_1} | \sigma_y | \psi_{\mu_2} \rangle = \frac{1}{2} \mathbf{u}_{\mu_1, \mu_2} (\mu_1 - \mu_2) , \quad \langle \psi_{\mu_1} | \sigma_z | \psi_{\mu_2} \rangle = \frac{1}{2} \mathbf{u}_{\mu_1, \mu_2} (1 - \mu_1 \mu_2) , \quad (6.121)$$

onde $\mathbf{u}_{\mu_1, \mu_2}$, que depende dos números quânticos de spin μ_1 e μ_2 , é ainda função das massas efetivas do modelo e das componentes $k_{||}$ e k_z do vetor de onda,

$$\mathbf{u}_{\mu_1, \mu_2} = \sqrt{1 + \mu_1 \frac{\mathbf{a}_5 k_{||} k_z}{\Gamma}} \sqrt{1 + \mu_2 \frac{\mathbf{a}_5 k_{||} k_z}{\Gamma}} . \quad (6.122)$$

Substituindo (6.120) e (6.121) na projeção dos estados $|\psi_\mu\rangle$ no hamiltoniano $W(t)$ e atuando em seguida os estados do espaço de Fock associados ao processo de absorção de

um fóton, temos

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\mu_1}; 0_{\mathbf{q},\alpha} | W(0) | \psi_{\mu_2}, 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle = & \mathbf{u}_{\mu_1, \mu_2} \sqrt{\frac{\pi e^2}{2\hbar\omega_q V}} \left\{ \frac{1}{k_{||}} [2\mathbf{a}_1 k_{||} (1 + \mu_1 \mu_2) - 2\mathbf{a}_3 k_{||} (\mu_1 + \mu_2) + \right. \\ & - \mathbf{a}_5 k_z (1 - \mu_1 \mu_2)] (\mathbf{k}_{||} \cdot \langle 0_{\mathbf{q},\alpha} | \mathbf{A} | 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle) + [2\mathbf{a}_2 k_z (1 + \mu_1 \mu_2) - 2\mathbf{a}_4 k_z (\mu_1 + \mu_2) + \\ & \left. - \mathbf{a}_5 k_{||} (1 - \mu_1 \mu_2)] (\hat{z} \cdot \langle 0_{\mathbf{q},\alpha} | \mathbf{A} | 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle) - i\mathbf{a}_5 \frac{k_z}{k_{||}} [\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{||} \times \langle 0_{\mathbf{q},\alpha} | \mathbf{A} | 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle)] (\mu_1 - \mu_2) \right\}. \end{aligned} \quad (6.123)$$

Como estamos trabalhando no regime da aproximação de dipolo elétrico, o elemento de matriz do potencial vetor na equação (6.123) é dado apenas em termos do versor de polarização $\epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha$ e de uma fase complexa que representa a oscilação do campo de radiação no tempo,

$$\langle 0_{\mathbf{q},\alpha} | \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) | 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle \approx \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_q V}} e^{-i\omega_q t}. \quad (6.124)$$

Entretanto, uma vez que a taxa de transição é especificada para o instante $t = 0$, substituindo (6.124) na equação (6.123) encontramos

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\mu_1}; 0_{\mathbf{q},\alpha} | W(0) | \psi_{\mu_2}, 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle = & \mathbf{u}_{\mu_1, \mu_2} \sqrt{\frac{\pi e^2}{2\hbar\omega_q V}} \left\{ \frac{1}{k_{||}} [2\mathbf{a}_1 k_{||} (1 + \mu_1 \mu_2) - 2\mathbf{a}_3 k_{||} (\mu_1 + \mu_2) + \right. \\ & - \mathbf{a}_5 k_z (1 - \mu_1 \mu_2)] (\mathbf{k}_{||} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha) + [2\mathbf{a}_2 k_z (1 + \mu_1 \mu_2) - 2\mathbf{a}_4 k_z (\mu_1 + \mu_2) + \\ & \left. - \mathbf{a}_5 k_{||} (1 - \mu_1 \mu_2)] (\hat{z} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha) - i\mathbf{a}_5 \frac{k_z}{k_{||}} [\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{||} \times \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha)] (\mu_1 - \mu_2) \right\}. \end{aligned} \quad (6.125)$$

Mas o que dizer a respeito de μ_1 e μ_2 ? Note que a escolha de um valor para o número quântico μ_1 fixa automaticamente o índice μ_2 . Conforme já discutimos, a promoção do elétron de condução entre dois níveis distintos via transições ressonantes define o processo de absorção mais significativo no que diz respeito a interação com um fóton. Neste tipo de transição, a energia que o fóton transfere ao elétron é igual a separação das energias na relação de dispersão,

$$\hbar\omega_q = E_{\mu_1}(k_{||}, k_z) - E_{\mu_2}(k_{||}, k_z) = (\mu_1 - \mu_2) \Gamma. \quad (6.126)$$

Observe que $\hbar\omega_q$ é positiva e diferente de zero apenas se $\mu_2 = -\mu_1 = -\mu$, ou seja, como esperado a energia do fóton é igual ao *splitting* devido a spin no espectro de energias do

elétron de condução. Assim, já que haverá uma transição apenas se a condição $\mu_2 = -\mu$ for respeitada, substituindo este resultado na equação (6.125) encontramos a forma final para o elemento de matriz do hamiltoniano que descreve o acoplamento elétron-fóton,

$$\langle \psi_\mu; 0_{\mathbf{q},\alpha} | W(0) | \psi_{-\mu}, 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle = -2u_{\mu,-\mu} \sqrt{\frac{\pi e^2}{2\hbar\omega_q V} \frac{\mathbf{a}_5}{k_{||}}} \left\{ k_z (\mathbf{k}_{||} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha) + k_{||}^2 (\hat{z} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha) + i\mu k_z [\hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{||} \times \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha)] \right\} . \quad (6.127)$$

Como ainda não fizemos nenhuma particularização para os versores de polarização que definem o campo de radiação, a equação (6.127) mostra que há três possíveis contribuições distintas para a probabilidade de transição por unidade de tempo. Em particular, o termo $\mathbf{k}_{||} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha$ é responsável pelas transições devido a spin *in plane*, ou seja, transições no plano perpendicular a direção z de crescimento da estrutura semicondutora. Situação totalmente distinta ocorre com o produto escalar $\hat{z} \cdot \epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha$ que se associa a transições devido a spin na direção paralela ao eixo z . Ademais, podemos naturalmente cancelar uma destas contribuições ajustando adequadamente os versores de polarização e a forma do vetor de onda $\mathbf{k}_{||}$ no plano. Entretanto, se seguirmos o procedimento que culminou na equação (6.98), levaremos em conta todos estes termos e não daremos tratamento específico aos versores $\epsilon_{\mathbf{q}}^\alpha$. Nesta parametrização, substituindo (6.98) na equação (6.127), temos

$$\langle \psi_\mu; 0_{\mathbf{q},\alpha} | W(0) | \psi_{-\mu}, 1_{\mathbf{q},\alpha} \rangle = -2u_{\mu,-\mu} \sqrt{\frac{\pi e^2}{2\hbar\omega_q V} \mathbf{a}_5} [(k_{||} \cos \varphi + k_z \sin \varphi) + i\mu k_z \sin \varphi] . \quad (6.128)$$

Dada a equação (6.122) onde definimos o parâmetro u_{μ_1,μ_2} , escolhendo os números quânticos $\mu_2 = -\mu_1 = -\mu$ encontramos a identidade

$$u_{\mu,-\mu} = \frac{\sqrt{\Gamma^2 - \mathbf{a}_5^2 k_{||}^2 k_z^2}}{\Gamma} = \frac{\mathbf{a}_3 k_{||}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2}{\Gamma} . \quad (6.129)$$

Agora estamos prontos para calcular a probabilidade de transição por unidade de tempo devido a absorção de um fóton. Para tanto, substituindo (6.128) e (6.129) na equação

(6.119) e calculando o módulo quadrado do elemento de matriz da perturbação $W(t)$,

$$\frac{P_{\mathbf{q}}^{\alpha}(t)}{t} = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar V \hbar \omega_q} \frac{(\mathbf{a}_3 k_{\parallel}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2)^2 \mathbf{a}_5^2}{[(\mathbf{a}_3 k_{\parallel}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2)^2 + \mathbf{a}_5^2 k_{\parallel}^2 k_z^2]} [2k_z \sin \varphi (k_{\parallel} \cos \varphi + k_z \sin \varphi) + k_{\parallel}^2 \cos^2 \varphi] \delta \left(\hbar \omega_q - 2\sqrt{(\mathbf{a}_3 k_{\parallel}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2)^2 + \mathbf{a}_5^2 k_{\parallel}^2 k_z^2} \right). \quad (6.130)$$

Como mostrado na equação (6.126), a energia que o fóton transfere ao elétron depende das componentes $k_{\parallel}$ e k_z através da função $\Gamma(k_{\parallel}, k_z)$ dada na equação (6.117), ou seja, $\hbar \omega_q = 2\Gamma$. Assim, reescrevendo (6.130) em termos deste vínculo e deixando explícita a forma do termo Γ na expressão resultante, a taxa de transição óptica na monoestrutura é

$$\tau(k_{\parallel}, k_z, \varphi) = \frac{2\pi^2 e^2}{\hbar V} \frac{(\mathbf{a}_3 k_{\parallel}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2)^2 \mathbf{a}_5^2}{[(\mathbf{a}_3 k_{\parallel}^2 + \mathbf{a}_4 k_z^2)^2 + \mathbf{a}_5^2 k_{\parallel}^2 k_z^2]^{3/2}} [k_{\parallel}^2 \cos^2 \varphi + 2k_z \sin \varphi (k_{\parallel} \cos \varphi + k_z \sin \varphi)]. \quad (6.131)$$

Conforme verificado nas equações (3.43), (3.38) e (3.39), esta expressão depende de parâmetros ligados a estrutura de bandas do semiconductor como o gap E_g e o *split-off* do campo cristalino Δ_c através das massas efetivas $\mathbf{a}_3$, $\mathbf{a}_4$ e $\mathbf{a}_5$, mas não depende do acoplamento spin-órbita Δ_{so} . Além disso, também é função dos parâmetros de Kane P_1 e P_2 . Quanto à dependência em relação ao ângulo de incidência φ do fóton, possui um extremo no ponto

$$\varphi = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2k_{\parallel} k_z}{k_{\parallel}^2 - 2k_z^2} \right). \quad (6.132)$$

Como a taxa de transição no caso da monoestrutura é função apenas de parâmetros ligados diretamente a estrutura de bandas do semiconductor, não há nenhuma dificuldade em construir alguns gráficos para tentar entender um pouco mais da física deste resultado. Assim, escolhemos os materiais InAs e InP que, conforme mostra a tabela 6.1, têm grandes diferenças no gap de energia.

Tabela 6.1 – Parâmetros da estrutura de bandas dos semicondutores InAs e InP. Estes valores são tomados tendo como base a referência (52).

	E_g (eV)	Δ_c (eV)	P_1 (eV·nm)
InAs	0.481	0.195	0.905
InP	1.474	0.303	0.888

Na figura 6.1 comparamos as frequências $\omega_q(k_{\parallel}, k_z)$ do fóton incidente em (6.126) para

o InAs e InP, dado o caso em que $\mu_2 = -$ e $\mu_1 = +$. Em particular, enquanto na figura 6.1(a) mostramos as frequências $\omega(k_{||}, 0)$ tomando $k_z = 0$, a figura 6.1(b) exhibe as frequências $\omega(0, k_z)$ quando a componente do vetor de onda no plano é nula, ou seja, $k_{||} = 0$. Em ambos os casos, a promoção de um elétron de condução entre os níveis de energia disponíveis está associada a frequências da luz incidente da ordem 10^{13} Hz. A intensidade destas frequências é bem maior no InAs quando comparadas ao InP tendo em vista a diferença entre os respectivos gaps de energia indicados na tabela 6.1. Aqui escolhemos os intervalos $0 \leq k_{||} \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$ e $|k_z| \leq 0.3 \text{ nm}^{-1}$ para construir os gráficos uma vez que, conforme mostramos no capítulo 5, o processo de linearização no inverso do gap E_g é consistente com a solução exata da equação secular da matriz de Kane 8×8 dada em (5.15).

Figura 6.1 – Frequências $\omega_q(k_{||}, k_z)$ do fóton incidente em (6.126) para o InAs e InP, dado o caso em que $\mu_2 = -$ e $\mu_1 = +$. Enquanto na figura 6.1(a) mostramos as frequências $\omega(k_{||}, 0)$ tomando $k_z = 0$, a figura 6.1(b) exhibe as frequências $\omega(0, k_z)$ quando a componente do vetor de onda no plano é nula, ou seja, $k_{||} = 0$. Em ambos os casos, a promoção de um elétron de condução entre os níveis de energia disponíveis está associada a frequências da luz incidente da ordem 10^{13} Hz. A intensidade destas frequências é bem maior no InAs quando comparadas ao InP tendo em vista a diferença entre os respectivos gaps de energia indicados na tabela 6.1.

A figura 6.2 mostra os gráficos da probabilidade de transição por unidade de tempo τ em função do ângulo de incidência φ do fóton para o InAs 6.2(a) e InP 6.2(b). Em ambos os casos, escolhemos os parâmetros de Kane P_1 e P_2 de cada material sendo iguais para reduzir o número de parâmetros independentes, ou seja, $P_2 = 0.905 \text{ eV} \cdot \text{nm}$ no InAs e $P_2 = 0.888 \text{ eV} \cdot \text{nm}$ para o InP. Adianto ao leitor que a diferença nestes parâmetros apenas aumenta ou diminui as intensidades das frequências de absorção. Além disso, cada curva se refere a um valor específico da componente k_z do vetor de onda tomando sempre o caso em que $k_{||} = 0.35 \text{ nm}^{-1}$. Observe que para cada material o aumento do valor de k_z

corresponde a um acréscimo nas amplitudes das taxas de transição. Devido a diferença no valor do gap E_g entre o InAs e o InP, a amplitude da taxa de transição é muito maior no InAs quando comparada ao InP. Note que o acréscimo na componente k_z do vetor de onda também se reflete numa diferença de fase entre as taxas de transição observadas em ambos materiais. A figura 6.3 exibe a taxa de transição óptica τ em função do ângulo de

Figura 6.2 – Taxa de transição óptica τ em função do ângulo de incidência φ do fóton na monoestrutura para o InAs 6.2(a) e InP 6.2(b). Aqui tomamos três valores distintos para a componente k_z (nm^{-1}) do vetor de onda e assumimos o caso em que os parâmetros de Kane são iguais $P_1 = P_2$. Além disso, as curvas são traçadas tomando a componente do vetor de onda $k_{||} = 0.35 \text{ nm}^{-1}$.

incidência φ do fóton para o InAs 6.3(a) e InP 6.3(b) de um modo um pouco diferente daquele mostrado na figura 6.2. Aqui, fixamos o valor $k_z = 0.15 \text{ nm}^{-1}$ e construímos as curvas das taxas de transição para três diferentes valores da componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano. De forma análoga ao caso anterior, um acréscimo na componente $k_{||}$ corresponde a um aumento gradual na amplitude da taxa de transição τ . Novamente, a diferença no valor do gap de energia entre os materiais semicondutores selecionados influi diretamente nas intensidades das frequências de absorção. Agora que analisamos um pouco as amplitudes de absorção via a dependência da taxa de transição óptica τ dada em (6.130) em termos do ângulo de incidência φ do fóton na monoestrutura semicondutora, vamos estudar agora como τ varia em função, por exemplo, da componente k_z do vetor de onda. Na figura 6.4 mostramos esta dependência para os materiais InAs 6.4(a) e InP 6.4(b) tomando três diferentes valores para a componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano. É importante notar ainda que cada curva é traçada considerando o ângulo de incidência $\varphi = 30^\circ$ para o fóton. Quanto às taxas de transição, note que há um alargamento no pico

Figura 6.3 – Taxa de transição óptica τ em função do ângulo de incidência φ do fóton na monoestrutura para o InAs 6.3(a) e InP 6.3(b). Aqui tomamos três valores distintos para a componente $k_{||}$ (nm^{-1}) do vetor de onda no plano e assumimos o caso em que os parâmetros de Kane são iguais $P_1 = P_2$. Além disso, as curvas são traçadas tomando a componente do vetor de onda $k_z = 0.15 \text{ nm}^{-1}$.

da amplitude de absorção para ambos materiais em resposta ao aumento da componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano. É particularmente notável a presença de um máximo em torno de $k_z = 0$ nas taxas de transição em ambos materiais. Este pico de intensidade pode ser interpretado como uma ressonância no processo de absorção do fóton pelo elétron de condução.

Figura 6.4 – Taxa de transição óptica τ em função da componente k_z do vetor de onda para o InAs 6.4(a) e InP 6.4(b) tomando o caso em que os parâmetros de Kane são iguais, $P_1 = P_2$. Note que as curvas são feitas escolhendo três valores para a componente $k_{||}$ (nm^{-1}) do vetor de onda no plano. Além disso, tomamos arbitrariamente o ângulo de incidência do fóton como $\varphi = 30^\circ$.

Para concluir, dado que as transições ópticas induzem a mudança na orientação do spin eletrônico, os resultados apresentados no decorrer deste capítulo podem ser úteis no desenvolvimento de novos dispositivos optoeletrônicos ou spintrônicos onde o semiconductor de rede wurtzita desempenha papel central.

Capítulo 7

Aplicações

Para concluir este trabalho, neste capítulo vamos discutir duas aplicações muito simples a partir do modelo de uma subbanda que estudamos na seção 4.2.1. A primeira delas diz respeito ao *Zitterbewegung* (65, 66), efeito com origens puramente relativísticas no movimento do elétron previsto em 1930 por Schrödinger ainda sem evidências experimentais (45). Atualmente, encontra em sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade a chance de se caracterizar efetivamente como um efeito físico observável em face das amplitudes de oscilação encontradas na posição do elétron (67, 68). A segunda aplicação se refere ao análogo eletrônico do modulador eletro-óptico na figura do transistor Datta-Das (6). Este transistor, o primeiro de efeito de campo de spin, foi idealizado em 1989 e reproduzido experimentalmente apenas 20 anos depois (7). De maneira geral, além de representar uma das grandes promessas no desenvolvimento de novas tecnologias baseadas no controle da precessão de spin em estruturas semicondutoras, é ainda motivo de boa parte da pesquisa científica que cerca a spintrônica (3).

7.1 Grades de difração por spin

7.1.1 Schrödinger, Dirac e o efeito *Zitterbewegung*

Em 1930 Schrödinger publicou um artigo (45) mostrando que, sob a prescrição relativística das soluções da equação de Dirac associada ao movimento de elétrons no vácuo, as componentes do operador velocidade não comutavam com o hamiltoniano do elétron livre. Assim, a velocidade do elétron não seria uma quantidade conservada na ausência de campos externos, um efeito que interpretou como consequência de sua natureza quântica. Schrödinger ainda calculou a dependência temporal resultante da velocidade e posição eletrônica concluindo que os elétrons experimentariam oscilações periódicas muito rápidas que chamou de *Zitterbewegung* (69). Embora o fenômeno descoberto por Schrödinger tenha motivado por anos diversos trabalhos teóricos, muito pouco se fez do ponto de vista experimental uma vez que a amplitude de oscilação eletrônica é da ordem do comprimento de onda de Compton λ_c (10^{-15} m), ou seja, frequências da ordem 10^{21} Hz (70). A conjunção destes fatores, isto é, amplitudes e frequências de oscilação praticamente inacessíveis frente a qualquer técnica experimental, ajudou a desconstruir por mais de 70 anos a imagem do *Zitterbewegung* como fenômeno físico observável e passou a rotulá-lo apenas como uma anomalia estrutural da equação de Dirac.

Em acordo ao que já pensava Schrödinger, algumas referências atribuem o *Zitterbewegung* a um tipo de interferência entre estados de energia positivas e negativas da equação de Dirac que, supostamente, originaria a criação e aniquilação de um par elétron-pósitron (11, 12, 16). Outros trabalhos apontam para o fato de que tanto o acoplamento spin-órbita quanto o termo de Darwin vindos da tradicional expansão da equação de Dirac em potências no inverso da velocidade da luz podem ser entendidos em termos do *Zitterbewegung*. Na referência (71) o autor mostra que este efeito estaria relacionado a um fator de fase complexo nas soluções da equação de Dirac para um elétron na ausência de campos externos. Este fator de fase seria devido a aspectos puramente algébricos da estrutura do espaço-tempo. Neste mesmo âmbito, as referências (72, 73) indicam relações entre as

amplitudes de oscilação no operador posição do elétron e a matriz de conexão presente na expressão da fase de Berry.

Por muitos anos acreditou-se que o *Zitterbewegung* também seria observado no movimento eletrônico em um sólido caso sua relação de dispersão pudesse ser representada similarmente ao modelo de duas bandas vindo da equação de Dirac. O primeiro passo nesta linha foi dado através de um artigo publicado em 1970 (74). Neste trabalho, os autores comparam a relação de dispersão relativística do elétron livre ao diagrama energia-momentum de um material supercondutor. Em virtude de que grande parte dos artigos publicados posteriormente a este seguiu as mesmas idéias, pouco se avançou na compreensão do *Zitterbewegung* de elétrons em sólidos. Entretanto, um artigo publicado em 2005 (66) voltou a chamar atenção para este efeito, em particular para a física de sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade onde o acoplamento spin-órbita é relevante. Em geral, traçando um paralelo entre a estrutura de bandas de um semicondutor calculada pelo método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e a equação relativística do elétron livre, obtém-se amplitudes de oscilação da ordem de centenas de angstroms para diversos materiais. Seguindo a mesma descrição, nas referências (24, 75) os autores mostram que o *spin splitting* linear em k nas energias de semicondutores de simetria cúbica leva ao *Zitterbewegung* se o momentum inicial dos elétrons de condução é diferente de zero. Muito embora os recentes desenvolvimentos teóricos apontem positivamente para a detecção do efeito *Zitterbewegung* em sólidos, é relativamente difícil observar o movimento de um único elétron.

Ainda que a formulação algébrica seja distinta em face daquela que utilizamos neste trabalho, recentemente foi descoberto um novo tipo de simetria $SU(2)$ na classe de modelos que descreve a interação spin-órbita, em particular para o caso onde as constantes de acoplamento de Rashba e Dresselhaus são iguais (76). Este resultado prevê a conservação da polarização por spin no modelo de subbandas em poços quânticos semicondutores, muito embora esta mesma simetria tenha se quebrado pela presença do acoplamento spin-órbita no hamiltoniano de Kane. Dentre as quantidades conservadas estão a amplitude e a fase de uma onda de spins helicoidal, termo conhecido na literatura como “*persistent spin helix*” (PSH) cujos efeitos foram medidos experimentalmente via técnicas modernas

de espectroscopia e publicados em 2009 (67). Uma vez que a separação entre os spins é da ordem de alguns nanômetros, o *persistent spin helix* representa um bom candidato para a fabricação de grades de difração tendo o spin como elemento principal (*spin gratings*). Além disso, acreditamos que o PSH é uma consequência do *Zitterbewegung*. Na próxima seção vamos analisar estes efeitos tendo como ponto de partida a evolução temporal dos operadores de posição e spin.

7.1.2 O efeito *Zitterbewegung* na wurtzita

Após a breve contextualização do problema, nesta seção vamos investigar o efeito *Zitterbewegung* à luz do modelo de uma subbanda que estudamos no capítulo 4. Em outras palavras, via a representação de Heisenberg calcularemos a evolução temporal dos operadores de posição e spin verificando se apresentam ou não o mesmo comportamento oscilatório obtido por Schrödinger para o movimento de um elétron livre relativístico. O motivo que envolve a escolha do caso de uma subbanda é puramente algébrico, ou seja, nossos cálculos na certa serão bem mais simples se trabalharmos com matrizes de dimensão 2×2 .

Partindo do hamiltoniano efetivo $\widetilde{H}$ escrito na base que diagonaliza o operador helicidade no plano, no capítulo 4 determinamos sua projeção na base de estados do poço quântico que acomoda apenas uma subbanda. Apenas para relembrar,

$$\widetilde{H} = \left(\mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} k_{\parallel}^2 \right) \mathbb{1}_{2 \times 2} - \left(\beta_{00} + \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} k_{\parallel}^2 \right) \sigma_x , \quad (7.1)$$

onde β_{00} , que em sistemas com simetria cúbica é interpretado como semelhante ao acoplamento de Dresselhaus (8), é dado na equação (4.37). Dada a matriz unitária T,

$$T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} , \quad (7.2)$$

mostramos na seção 4.2.1 que o hamiltoniano $\widetilde{H}$ passa a ser diagonal sob ação da trans-

formação de similaridade caracterizada por esta matriz,

$$\mathbf{T}^\dagger \widetilde{H} \mathbf{T} = \text{diag}(E_+, E_-), \quad (7.3)$$

onde as energias do sistema são generalizadas através da relação

$$E_\mu(k_{||}) = \mathcal{E}_0 + \mu\beta_{00} + \left(\frac{\hbar^2}{2m_{||}} + \mu \frac{\hbar^2}{2M_{||}} \right) k_{||}^2. \quad (7.4)$$

Aqui o número quântico $\mu = \pm$ está naturalmente ligado a multiplicidade introduzida pelo grau de liberdade de spin. Como desejamos calcular a evolução temporal dos operadores posição e spin, será muito mais fácil utilizar a representação de Heisenberg no estudo da dinâmica do elétron de condução. Assim, uma vez que a figura central nesta prescrição é o operador de evolução $U(t)$ e $\widetilde{H}$ é o hamiltoniano que descreve o elétron confinado na heteroestrutura semicondutora, então

$$U(t) \equiv e^{-i\widetilde{H}t/\hbar} = \frac{1}{2} \left(e^{-i\omega_- t} + e^{-i\omega_+ t} \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} + \frac{1}{2} \left(e^{-i\omega_- t} - e^{-i\omega_+ t} \right) \sigma_x, \quad (7.5)$$

onde as frequências $\omega_\pm$ dependem do acoplamento β_{00} , da energia $\mathcal{E}_0$, das massas efetivas $m_{||}$ e $M_{||}$, e ainda da componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano,

$$\omega_\pm = \frac{(\mathcal{E}_0 \pm \beta_{00})}{\hbar} + \left(\frac{\hbar}{2m_{||}} \pm \frac{\hbar}{2M_{||}} \right) k_{||}^2. \quad (7.6)$$

Agora que conhecemos a forma do operador de $U(t)$ estamos prontos para determinar a evolução temporal dos operadores de posição e spin. Antes, porém, devemos discutir um aspecto muito importante que não pode passar despercebido nos cálculos. O leitor deve se lembrar que no capítulo 3 determinamos o hamiltoniano efetivo H que descreve um elétron na banda de condução do semicondutor. Em seguida, submetemos H à ação da transformação de similaridade que diagonaliza o operador helicidade Σ no plano, resultado que nos levou ao novo hamiltoniano $\widetilde{H}$. Esta transformação de similaridade é caracterizada pela matriz unitária

$$\Lambda = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} +e^{-i\vartheta} & -e^{-i\vartheta} \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad e^{\pm i\vartheta} = \frac{k_\pm}{k_{||}}. \quad (7.7)$$

Neste sentido, como o operador $U(t)$ foi obtido a partir do hamiltoniano efetivo $\widetilde{H}$,

devemos ser coerentes o suficiente e calcular a evolução temporal das componentes do operador posição também na base de Σ . Em outras palavras, dada a coordenada X_j do operador posição livre de qualquer tipo de projeção, temos

$$\overline{X}_j = \Lambda^\dagger X_j \Lambda , \quad (7.8)$$

onde $j \in \{1, 2\}$, $\overline{X}_1 = \overline{X}$ e $\overline{X}_2 = \overline{Y}$. Mas, como o operador posição atua na matriz Λ ? Na busca por esta resposta, nossa tarefa agora será desenvolver um método eficiente de calcular o lado direito da equação (7.8). Conforme observado na equação (7.7), a matriz Λ é função das componentes k_x e k_y do vetor de onda, ou seja, $\Lambda = \Lambda(k_x, k_y)$. A partir desta informação, segue diretamente da álgebra de comutação entre operadores a igualdade

$$X_j \Lambda = \Lambda X_j + i\hbar \frac{\partial}{\partial p_{x_j}} \Lambda = \Lambda X_j + i \frac{\partial}{\partial k_{x_j}} \Lambda . \quad (7.9)$$

Sendo a matriz Λ unitária, ou seja, $\Lambda^\dagger \Lambda = \mathbb{1}_{2 \times 2}$, ao projetar $\Lambda^\dagger$ à esquerda de ambos os lados da equação (7.9) encontramos a expressão

$$\overline{X}_j = X_j \mathbb{1}_{2 \times 2} + i \Lambda^\dagger \frac{\partial}{\partial k_{x_j}} \Lambda . \quad (7.10)$$

Esta equação é bem interessante do ponto de vista algébrico uma vez que sabemos calcular analiticamente todos os seus termos. Assim, atuando o operador $U(t)$ na equação (7.10), vamos calcular a evolução temporal de $\overline{X}_j$, a saber,

$$\overline{X}_j(t) = U^\dagger(t) X_j U(t) + i U^\dagger(t) \Lambda^\dagger \left[\frac{\partial}{\partial k_{x_j}} \Lambda \right] U(t) . \quad (7.11)$$

Analisando este resultado, o primeiro termo no lado direito da equação (7.11) é o único que oferece alguma dificuldade visto que não sabemos como o operador X_j atua em $U(t)$. Entretanto, assim como a matriz Λ na equação (7.9), as entradas do operador de evolução também dependem das componentes k_x e k_y do vetor de onda via as frequências $\omega_\pm$. A partir deste fato, recorrendo à relação de comutação

$$X_j U(t) = U(t) X_j + i \frac{\partial}{\partial k_{x_j}} U(t) , \quad (7.12)$$

explorando o caráter a unitário das matrizes Λ e $U(t)$ e reconhecendo a derivada do

produto entre estes operadores, temos

$$\bar{X}_j(t) = X_j \mathbf{1}_{2 \times 2} + i[\Lambda U(t)]^\dagger \frac{\partial}{\partial k_{x_j}} [\Lambda U(t)] . \quad (7.13)$$

Em outras palavras, tomando os casos $j = 1$ e $j = 2$, a partir dela somos agora capazes de calcular a evolução temporal de todas as coordenadas do operador posição, independentemente inclusive da dimensão das matrizes Λ e $U(t)$. O leitor atento deve por um momento ter se perguntado sobre o índice $j = 3$ relativo a coordenada Z . Entretanto, como o produto $\Lambda U(t)$ independe da coordenada k_z do vetor de onda, a derivada parcial na equação (7.13) é identicamente nula para o índice $j = 3$ tal que o operador Z não apresenta dinâmica de evolução. Isto já era naturalmente esperado uma vez que o movimento é quantizado no eixo z .

No apêndice F calculamos em detalhes o segundo termo no lado direito da equação (7.13) para os casos $j = 1$ e $j = 2$. Os cálculos são bem simples tendo em vista a dimensão das matrizes envolvidas, havendo um cuidado especial ao tomar as derivadas parciais. Substituindo aqui apenas os resultados, temos portanto as equações para a evolução temporal das coordenadas $\bar{X}$ e $\bar{Y}$ do operador posição na base de Σ ,

$$\bar{X}(t) = X \mathbf{1}_{2 \times 2} - \frac{1}{2} \left\{ \frac{k_y}{k_{||}^2} - \frac{(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} t \hbar k_x \right\} \mathbf{1}_{2 \times 2} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{k_y}{k_{||}^2} + \frac{(m_1 - m_2)}{m_1 m_2} t \hbar k_x \right\} \sigma_x , \quad (7.14)$$

$$\bar{Y}(t) = Y \mathbf{1}_{2 \times 2} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{k_x}{k_{||}^2} + \frac{(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} t \hbar k_y \right\} \mathbf{1}_{2 \times 2} - \frac{1}{2} \left\{ \frac{k_x}{k_{||}^2} - \frac{(m_1 - m_2)}{m_1 m_2} t \hbar k_y \right\} \sigma_x , \quad (7.15)$$

onde definimos as novas massas efetivas

$$\frac{1}{m_1} = \frac{M_{||} + m_{||}}{m_{||} M_{||}} , \quad \frac{1}{m_2} = \frac{M_{||} - m_{||}}{m_{||} M_{||}} . \quad (7.16)$$

Os resultados expressos nas equações (7.14) e (7.15) servem bem aos nossos propósitos e já poderíamos nos dar por satisfeitos. Entretanto, nada melhor que conhecer a evolução temporal independentemente da projeção em qualquer base, em particular aqui na base do operador helicidade. Além de mais geral, este resultado se conecta diretamente ao hamiltoniano efetivo H associado ao espinor ψ_0 da banda de condução. Assim, para obter $X(t)$ e $Y(t)$ devemos submeter $\bar{X}(t)$ e $\bar{Y}(t)$ à ação da transformação de similaridade

inversa, ou seja,

$$\begin{aligned} X(t) = \Lambda \bar{X}(t) \Lambda^\dagger = X \mathbb{1}_{2 \times 2} + i\Lambda \frac{\partial}{\partial k_x} \Lambda^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ \frac{k_y}{k_{||}^2} - \frac{(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} t \hbar k_x \right\} \mathbb{1}_{2 \times 2} + \\ + \frac{1}{2} \left\{ \frac{k_y}{k_{||}^2} + \frac{(m_1 - m_2)}{m_1 m_2} t \hbar k_x \right\} \Lambda \sigma_x \Lambda^\dagger, \quad (7.17) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Y(t) = \Lambda \bar{Y}(t) \Lambda^\dagger = Y \mathbb{1}_{2 \times 2} + i\Lambda \frac{\partial}{\partial k_y} \Lambda^\dagger + \frac{1}{2} \left\{ \frac{k_x}{k_{||}^2} + \frac{(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} t \hbar k_y \right\} \mathbb{1}_{2 \times 2} + \\ - \frac{1}{2} \left\{ \frac{k_x}{k_{||}^2} - \frac{(m_1 - m_2)}{m_1 m_2} t \hbar k_y \right\} \Lambda \sigma_x \Lambda^\dagger. \quad (7.18) \end{aligned}$$

Conhecendo a ação das derivadas parciais nas variáveis k_x e k_y em relação a matriz Λ ,

$$\Lambda \frac{\partial}{\partial k_x} \Lambda^\dagger = -i \frac{k_y}{2k_{||}^2} (\sigma_z + \mathbb{1}_{2 \times 2}), \quad \Lambda \frac{\partial}{\partial k_y} \Lambda^\dagger = +i \frac{k_x}{2k_{||}^2} (\sigma_z + \mathbb{1}_{2 \times 2}), \quad (7.19)$$

e ainda sabendo que $\Lambda \sigma_x \Lambda^\dagger = -\sigma_z$, ao substituir estes resultados nas equações (7.17) e (7.18) encontramos as novas expressões

$$X(t) = X \mathbb{1}_{2 \times 2} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} \mathbb{1}_{2 \times 2} - \frac{(m_1 - m_2)}{m_1 m_2} \sigma_z \right\} t \hbar k_x, \quad (7.20)$$

$$Y(t) = Y \mathbb{1}_{2 \times 2} + \frac{1}{2} \left\{ \frac{(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} \mathbb{1}_{2 \times 2} - \frac{(m_1 - m_2)}{m_1 m_2} \sigma_z \right\} t \hbar k_y. \quad (7.21)$$

A partir das massas efetivas definidas em (7.16) são válidas as seguintes igualdades

$$\frac{(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} = \frac{2}{m_{||}}, \quad \frac{(m_1 - m_2)}{m_1 m_2} = -\frac{2}{M_{||}}. \quad (7.22)$$

Assim, substituindo (7.22) no par de equações (7.20) e (7.21) encontramos finalmente as equações que ditam a evolução temporal para as componentes $X(t)$ e $Y(t)$ do operador posição no âmbito do modelo de uma subbanda,

$$X(t) = X \mathbb{1}_{2 \times 2} + \left(\frac{1}{m_{||}} \mathbb{1}_{2 \times 2} + \frac{1}{M_{||}} \sigma_z \right) t \hbar k_x, \quad (7.23)$$

$$Y(t) = Y \mathbb{1}_{2 \times 2} + \left(\frac{1}{m_{||}} \mathbb{1}_{2 \times 2} + \frac{1}{M_{||}} \sigma_z \right) t \hbar k_y. \quad (7.24)$$

Frente a tudo aquilo que se pode observar e concluir a partir destas equações, nada mais forte que a ausência do efeito *Zitterbewegung*. Em outras palavras, por depender linearmente no tempo, as componentes $X(t)$ e $Y(t)$ não apresentam o mesmo comportamento

oscilatório encontrado por Schrödinger (45) para o movimento de um elétron livre no vácuo. É importante ressaltar, entretanto, que este mesmo resultado pode deixar de valer se incluirmos no hamiltoniano efetivo H correções de segunda ordem no inverso do gap de energia. De modo geral, mesmo no caso de uma subbanda, a presença destas contribuições pode gerar dependências oscilatórias vindas diretamente de termos que não se cancelam nos produtos matriciais que desenvolvemos para chegar nas equações (7.23) e (7.24). Voltando ao nosso resultado, $X(t)$ e $Y(t)$ são funções lineares respectivamente das coordenadas k_x e k_y do vetor de onda. Além disso, conforme visto através das equações (3.36) e (3.38), dependem de parâmetros ligados a estrutura de bandas do semiconductor como o gap E_g , o *split-off* do campo cristalino Δ_c e o acoplamento spin-órbita Δ_{so} . Uma vez que $X(t)$ e $Y(t)$ são componentes do operador posição $\mathbf{R}(t)$, então podemos escrever

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}_0 \mathbf{1}_{2 \times 2} + \left(\frac{1}{m_{\parallel}} \mathbf{1}_{2 \times 2} + \frac{1}{M_{\parallel}} \sigma_z \right) t \hbar \mathbf{k}_{\parallel} , \quad (7.25)$$

onde definimos $\mathbf{R}_0 = (X, Y)$ como a coordenada inicial do elétron no plano.

Resta agora analisar a evolução temporal do operador de spin

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) . \quad (7.26)$$

Novamente, como o hamiltoniano $\widetilde{H}$ está representado na base do operador helicidade sob ação da matriz Λ , manteremos portanto a mesma coerência calculando as componentes do novo operador momento angular de spin $\overline{\mathbf{S}} = \Lambda^\dagger \mathbf{S} \Lambda$, ou seja,

$$\overline{S}_x = \frac{\hbar}{2k_{\parallel}} (k_x \sigma_z - k_y \sigma_y) , \quad \overline{S}_y = \frac{\hbar}{2k_{\parallel}} (k_y \sigma_z + k_x \sigma_y) , \quad \overline{S}_z = -\frac{\hbar}{2} \sigma_x . \quad (7.27)$$

Uma consequência imediata deste resultado é que a componente $\overline{S}_z$ representa uma quantidade conservada dado que comuta com o hamiltoniano $\widetilde{H}$ do modelo de uma subbanda,

$$[\widetilde{H}, \overline{S}_z] = 0 . \quad (7.28)$$

O leitor atento perceberá que esta comutação não está de acordo com a forma original do hamiltoniano $\widetilde{H}$ dado em (4.8), dependente em spin através dos operadores σ_x e σ_z . Mas, então, como explicar a identidade dada em (7.28)? Conforme comentamos na seção 4.2.1, na projeção deste hamiltoniano na base de estados $\{|u_0, \downarrow\rangle, |u_0, \uparrow\rangle\}$ do modelo de uma

subbanda, o acoplamento dependente de spin $|\eta_{nm}|$ definido em (4.29) é identicamente nulo no caso em que $m = n$. Mais especificamente, como o elemento de matriz $\langle u_n | k_z | u_n \rangle$ do operador k_z é zero para uma mesma autofunção do poço quântico, no caso $u_0(z)$, a dependência do hamiltoniano $\widetilde{H}$ em σ_z desaparece completamente após a referida projeção. Já que o novo hamiltoniano $\widetilde{H}$ expresso em (7.1) é função apenas da matriz identidade e de σ_x , vale portanto a relação de comutação escrita em (7.28) e $\overline{S}_z$ representa uma quantidade conservada. Vale ressaltar que este comportamento também é observado em sistemas cúbicos. Neste último caso, algumas referências (76) associam a conservação da componente S_z do vetor de spin à emergência de uma simetria de rotação SU(2) antes quebrada devido a presença do acoplamento spin-órbita na figura das interações de Dresselhaus (21) e Rashba (22) no hamiltoniano que descreve o sistema.

Para concluir, vamos agora estudar a evolução temporal do operador de spin, ou seja, $\overline{\mathbf{S}}(t) = U^\dagger(t) \overline{\mathbf{S}} U(t)$. De posse do operador de evolução dado na equação (7.5), após algumas simples manipulações algébricas podemos escrever

$$\overline{S}_x(t) = \frac{\hbar}{4k_{||}} \left\{ k_- e^{-i(\omega_+ - \omega_-)t} (\sigma_z - i\sigma_y) + k_+ e^{+i(\omega_+ - \omega_-)t} (\sigma_z + i\sigma_y) \right\} , \quad (7.29)$$

$$\overline{S}_y(t) = \frac{i\hbar}{4k_{||}} \left\{ k_- e^{-i(\omega_+ - \omega_-)t} (\sigma_z - i\sigma_y) - k_+ e^{+i(\omega_+ - \omega_-)t} (\sigma_z + i\sigma_y) \right\} , \quad (7.30)$$

$$\overline{S}_z(t) = -\frac{\hbar}{2} \sigma_x . \quad (7.31)$$

Tendo em vista que estes resultados assumem um caráter mais arbitrário tratando-os livres de projeções em bases de estado particulares, no caso aqui a base do operador helicidade, atuando a transformação inversa $\Lambda \overline{\mathbf{S}} \Lambda^\dagger$ temos finalmente a evolução temporal das componentes do operador $\mathbf{S}$, a saber,

$$S_x(t) = +\frac{\hbar}{4} \left\{ e^{+i\varpi t} (\sigma_x + i\sigma_y) + e^{-i\varpi t} (\sigma_x - i\sigma_y) \right\} , \quad (7.32)$$

$$S_y(t) = -\frac{i\hbar}{4} \left\{ e^{+i\varpi t} (\sigma_x + i\sigma_y) - e^{-i\varpi t} (\sigma_x - i\sigma_y) \right\} , \quad (7.33)$$

$$S_z(t) = +\frac{\hbar}{2} \sigma_z , \quad (7.34)$$

onde a frequência ϖ é definida em termos da diferença das frequências $\omega_\pm$ dadas na

equação (7.6),

$$\varpi(k_{\parallel}) = \omega_+ - \omega_- = \frac{\bar{P}_1^2}{3\hbar} \frac{\Delta_c}{E_g(E_g + \Delta_c)} k_{\parallel}^2 + 2 \frac{\beta_{00}}{\hbar} . \quad (7.35)$$

Curiosamente, ao contrário do operador posição, a evolução temporal das componentes S_x e S_y do operador de spin exhibe o efeito *Zitterbewegung*. Naturalmente, a componente S_z não possui dependência temporal já que, como comuta com o hamiltoniano $\widetilde{H}$, é uma quantidade conservada do sistema.

Vamos encerrar esta seção com uma aplicação dos resultados que encontramos. Discutimos no final da seção 7.1.1 que o *Zitterbewegung* está relacionado a emergência de um efeito conhecido como *persistent spin helix* (PSH) (76). Uma vez que a separação entre os spins é da ordem de poucos nanômetros, este efeito de precessão sugere naturalmente a construção de grades de difração baseadas em spin. Para observar a precessão dos spins partiremos das equações (7.25), (7.32) e (7.33). A idéia central se resume em projetar a evolução temporal dos operadores posição e spin em um autoestado eletrônico com polarização definida. Considere então a injeção de elétrons com spins polarizados sob um ângulo de 45° no gás bidimensional confinado no poço quântico com uma subbanda da junção semicondutora de rede wurtzita. Na prática, esta injeção é representada pelo vetor de estado normalizado

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle) . \quad (7.36)$$

A partir deste espinor, o valor médio da evolução temporal do operador posição é

$$\langle \mathbf{R}(t) \rangle = \langle \chi | \mathbf{R}(t) | \chi \rangle = \mathbf{R}_0 + \frac{\hbar \mathbf{k}_{\parallel}}{m_{\parallel}} t . \quad (7.37)$$

Procedendo da mesma maneira em relação as componentes do operador de spin, temos

$$\langle S_x(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\varpi t) , \quad \langle S_y(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\varpi t) , \quad \langle S_z(t) \rangle = 0 . \quad (7.38)$$

A dependência temporal linear do valor esperado do operador posição garante que os valores esperados das componentes do operador de spin sejam campos harmônicos com período $\tau = 2\pi/\varpi$. Após uma rotação completa no sentido horário dos spins dos elétrons

injetados no gás bidimensional do poço quântico, estes portadores viajam uma distância

$$l = \frac{\hbar k_{||}}{m_{||}} \tau = 2\pi \frac{\hbar}{m_{||}} \frac{k_{||}}{\varpi}, \quad (7.39)$$

onde a frequência $\varpi = \varpi(k_{||})$ é dada na equação (7.35) e é uma função quadrática na componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano. Como os valores médios das componentes do

Figura 7.1 – Grade de spins retilínea 7.1(a) e circular 7.1(b). As linhas e curvas verdes em ambas figuras mostram as posições após meio período; analogamente as linhas e curvas vermelhas mostram a posição da partícula após um período completo.

operador de spin definem um campo vetorial em função dos valores médios das coordenadas do operador posição, nada mais justo que fazer alguns gráficos de suas respectivas evoluções temporais. A figura 7.1 mostra dois tipos distintos de grades de spin que podemos encontrar. A figura 7.1(a) mostra uma grade de spin retilínea formada pela injeção de todos os elétrons a partir de uma linha vertical com o mesmo vetor de onda paralelo a direção horizontal. Um elétron injetado em $\langle X(t) \rangle = 0$ apresenta um movimento linear no tempo enquanto os valores esperados $\langle S_x(t) \rangle$ e $\langle S_y(t) \rangle$ das referidas componentes do vetor de spin $\mathbf{S}(t)$ oscilam no plano do gás bidimensional confinado no poço quântico. As linhas verticais em verde e vermelho representam as posições alcançadas após meio e um período, respectivamente. Se, porventura, todos os elétrons são injetados de um mesmo ponto com vetores de onda tendo a mesma intensidade, independentemente de suas direções, temos então o que se pode chamar de grade de spin circular mostrada na figura 7.1(b). Novamente, as linhas verdes e vermelhas denotam as posições após meio e um período, respectivamente.

O efeito *persistent spin helix* é observado em sistemas cúbicos. Na verdade, sua previsão na referência (76) desencadeou diversos trabalhos de cunho teórico e experimental (68) que, além da essência física do fenômeno, passaram a estudar aspectos um tanto mais sutis como o tempo de vida e relaxação dos vetores de spin (77). Em um deles, o tempo de vida dos vetores de polarização de spin é medido tendo em vista a emergência do PSH no gás bidimensional confinado em poços quânticos de GaAs (67). Muito embora o estudo do tempo de vida dos vetores de spin esteja fora do alcance deste trabalho, o padrão de precessão dos spins da grade linear dada na figura 7.1(a) está de acordo com aquele reportado nas referências (67,68). Particularmente no que diz respeito a referência (68), o PSH é verificado sob duas abordagens. Na primeira, o estado final dos elétrons polarizados injetados em um ponto arbitrário no gás bidimensional é obtido via a ação do operador translação no estado inicial destes portadores. O valor esperado do vetor de spin $\mathbf{S} = \hbar/2(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ é então calculado através deste estado final e o efeito de precessão de spin é observado. Num segundo caso, o mesmo vetor de spin é calculado resolvendo a equação de Heisenberg para esta quantidade, procedimento ligeiramente similar àquele que usamos no decorrer desta seção. Ao final, observa-se que ambos tratamentos originam o mesmo efeito de precessão de spin que é característica do PSH. Ainda que nosso caso se refira ao sistema hexagonal, o padrão de precessão dos vetores de spin encontrado aqui via o *Zitterbewegung* para a rede wurtzita tem a mesma forma daquele observado nesta referência. Se comparado particularmente ao resultado vindo do formalismo de Heisenberg neste artigo, nosso resultado sugere que o PSH seja aqui uma consequência do efeito *Zitterbewegung*.

7.2 O transistor Datta-Das

7.2.1 O transistor de efeito de campo por spin

Dentre todas as promessas da spintrônica aquela de maior sucesso sem dúvida diz respeito ao transistor de efeito de campo por spin (*Spin Field Effect Transistor* ou Spin-FET) proposto por Datta-Das em 1990 (6). A essência deste dispositivo envolve o controle da condutividade de seus canais através de um campo elétrico. Em materiais semicondutores com simetria cúbica onde a constante de acoplamento de Rashba α depende de campos elétricos externos, é possível controlar o spin de um elétron injetado no gás bidimensional confinado no poço quântico. Apesar de um transistor de efeito de campo comum*, o transistor proposto por Datta-Das larga na frente pois permite a manipulação dos estados de spin dos elétrons injetados no canal semicondutor sem a necessidade de correntes elétricas. Os benefícios tecnológicos mais imediatos envolvem a rapidez e eficiência na leitura e processamento de dados. Este resultado é um dos motivos das altas cifras investidas pela indústria de semicondutores em pesquisa básica e desenvolvimento de novos materiais.

Figura 7.2 – Visão pictórica do transistor de efeito de campo por spin (SPIN-FET) desenvolvido por Datta-Das (6). A proposta original deste dispositivo consiste de um canal semicondutor e dois contatos ferromagnéticos (FM) sob ação de uma diferença de potencial externa (*gate*) aplicada ao sistema. Um feixe de elétrons com vetor de polarização de spin definido é injetado pela fonte ferromagnética à esquerda no poço quântico que confina o gás bidimensional na heteroestrutura que compõe o canal semicondutor. Modulando a distância L (comprimento do poço quântico) percorrida pelos elétrons injetados no canal, o vetor de polarização de spin do feixe de elétrons medido no coletor ferromagnético à direita pode ser diferente daquele inicial. Figura extraída da referência (43).

A proposta original do transistor de spin apresentada por Datta-Das era de fato bem simples e baseava-se no chamado modulador eletro-óptico. A figura 7.2 apresenta alguns

*Por exemplo, o MOSFET.

detalhes deste transistor. Em sua essência, o dispositivo consistia de dois contatos ferromagnéticos e um canal semicondutor formado pelo gás de elétrons bidimensional confinado no poço quântico descrito pelos potenciais estruturais de uma heteroestrutura. Um destes canais ferromagnéticos, a fonte, tinha por função injetar elétrons com polarização de spin paralela a direção de sua magnetização no gás bidimensional. O outro contato coletava o feixe de elétrons após percorrer o canal semicondutor. Uma vez que a constante de acoplamento de Rashba em sistemas cúbicos depende do campo elétrico aplicado (*gate*) (22, 23), é perfeitamente possível controlar o estado final de spin dos elétrons injetados. Sendo L a distância entre os contatos ferromagnéticos[†], se $\alpha = \pi\hbar/2mL$ o elétron tem estado final de spin *up* $|\uparrow\rangle$. Contrariamente, se $\alpha = \pi\hbar/mL$ o estado final do elétron no coletor é spin *down* $|\downarrow\rangle$ (41, 44).

Muito embora tenha sido proposto no início da década de 90, o transistor de spin só foi reproduzido experimentalmente quase 20 anos depois (7). Dentre as dificuldades técnicas que postergaram durante décadas o desenvolvimento experimental deste dispositivo podemos citar o tempo de coerência de spin, a qualidade dos materiais semicondutores utilizados como canal e a eficiência dos contatos ferromagnéticos na interface entre estas estruturas, a detecção dos portadores polarizados pelo coletor ferromagnético, além de mecanismos de *spin-flip* indesejáveis.

7.2.2 O transistor Datta-Das na wurtzita

Agora que mostramos um pouco do cenário acerca do transistor de efeito de campo por spin, vamos reformular este dispositivo à luz do poço quântico com apenas uma subbanda formado na heteroestrutura de um semicondutor de rede wurtzita. Buscando a maior simplicidade possível, nesta abordagem reduziremos o problema ao caso unidimensional, privilegiando sempre a direção x .

[†]Em outras palavras, o poço quântico também tem comprimento L .

A prescrição geral de Datta-Das para o transistor de spin sugere a presença de dois contatos ferromagnéticos e uma junção semicondutora. De forma geral, os contatos ferromagnéticos têm magnetização ao longo do gás bidimensional e paralelas entre si. Um destes canais, a fonte, injeta um feixe de elétrons com spins alinhados na mesma direção de sua magnetização, a qual admitiremos ser a direção x . Em particular, consideraremos que a fonte se encontra na região definida por $x < 0$. Se não há precessão de spin devido a interação spin-órbita, os elétrons chegam ao coletor ferromagnético na outra extremidade do transistor com a mesma polarização de spin inicial. Naturalmente, os elétrons no material ferromagnético são caracterizados pelo vetor de onda de Fermi k_F . Na junção semicondutora, também chamada canal, forma-se um poço quântico de dimensões nanométricas na direção z que confina o movimento eletrônico no plano xy . A idéia aqui consiste em usar os resultados do poço quântico com uma subbanda obtidos no capítulo 4 ao reformular o transistor de spin. Como já sabido, as componentes do vetor de onda dos elétrons de condução no canal semicondutor são representadas por k_x e k_y , enquanto $k_{||}$ indica o módulo do vetor de onda no plano xy . Ademais, o gás bidimensional estará definido na região $x > 0$, ou seja, a fonte ferromagnética e o canal semicondutor entram em contato no ponto $x = 0$.

Mas o que dizer sobre o processo de injeção no canal semicondutor? Bem, muito embora seja uma idealização grosseira, a fonte ferromagnética seleciona e injeta apenas aqueles elétrons polarizados na direção x com máxima eficiência possível. Além disso, alguns dos grande problemas que postergaram por anos a reprodutibilidade do transistor de efeito de campo de spin estavam relacionados a detecção dos portadores polarizados pelo coletor, a qualidade das estruturas semicondutoras crescidas e das interfaces com o ferromagneto. Para fins práticos, não levaremos nenhum destes efeitos em conta.

Superadas as dificuldades mencionadas, vamos tratar então da dinâmica dos elétrons injetados pela fonte no gás bidimensional confinado no poço quântico. Seja um feixe de elétrons com polarização de spin definida pelo vetor de estado $(1/\sqrt{2})(|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle)$. Em termos do caráter ondulatório dos elétrons, a injeção da fonte no canal pode ser representada em termos de uma onda plana que caminha na região $x < 0$ e incide no ponto $x = 0$

de contato entre o ferromagneto e a heteroestrutura semicondutora. O feixe de elétrons injetado é dado então pela onda transmitida na região $x > 0$. Como é natural em um processo de espalhamento, o espinor que descreve a incidência e a reflexão na região $x < 0$ é dado por

$$\Psi|_{x<0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(A_+ e^{+ik_F x} + A_- e^{-ik_F x} \right) (|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle) . \quad (7.40)$$

E quanto ao comportamento dos elétrons injetados no canal semicondutor? Para responder a esta pergunta, devemos analisar alguns aspectos do modelo de uma subbanda que descreve o gás bidimensional confinado no poço quântico. O leitor deve se lembrar que, sob a ação da transformação de similaridade caracterizada pela matriz unitária T dada em (7.2), o hamiltoniano efetivo $\widetilde{H}$ em (7.1) assume a forma diagonal

$$T^{-1} \widetilde{H} T = \left(\mathcal{E}_0 + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} k_{\parallel}^2 \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} + \left(\beta_{00} + \frac{\hbar^2}{2M_{\parallel}} k_{\parallel}^2 \right) \sigma_z . \quad (7.41)$$

Além disso, vimos no capítulo 4 que os autoestados do hamiltoniano $\widetilde{H}$ são dados pelo produto direto entre a autofunção $|u_0\rangle$ do poço quântico e os estados de spin $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ através da relação

$$|u_0, \mu\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u_0\rangle \otimes (|\downarrow\rangle + \mu |\uparrow\rangle) , \quad (7.42)$$

onde $\mu = \pm$ representa um número quântico de spin. A partir da equação (7.42) é possível perceber que o feixe de elétrons incidente pode popular qualquer um dos estados de spin disponíveis no gás bidimensional. Em outras palavras, o feixe pode sofrer um *split* e ser escrito como combinação linear dos estados de spin *up* e *down*. Existe, entretanto, um detalhe mais sutil. Uma vez que a interação dependente de spin no hamiltoniano efetivo quebra a degenerescência da relação de dispersão do modelo de uma subbanda, o espectro se ramifica em duas curvas de energia. É possível, portanto, encontrar situações onde diferentes vetores de onda estejam relacionados a mesma energia. Na figura 7.3 representamos um exemplo genérico deste caso tomando por simplicidade $k_y = 0$. Os vetores de onda k_+ e k_- ligados às curvas de energia com spin *up* e *down*, respectivamente, estão conectados diretamente ao mesmo autovalor de energia. Assim, os elétrons injetados no canal semicondutor apresentarão vetores de onda distintos devido a multiplicidade no

Figura 7.3 – Representação pictórica da relação de dispersão do modelo de uma subbanda. Muito embora o poço quântico comporte apenas um estado ligado, a interação dependente de spin abre a degenerescência do espectro em dois ramos de energia com polarização de spin definida. Na figura, as curvas vermelha e azul correspondem aos estados de spin *up* (+) e *down* (−), respectivamente. No detalhe, observe que os vetores de onda k_+ (spin *up*) e k_- (spin *down*) estão relacionados à mesma energia.

grau de liberdade de spin, tal que o espinor que descreve a onda transmitida na região $x > 0$ é dado por

$$\Psi|_{x>0} = B_+ e^{+ik_+x} |\uparrow\rangle + C_+ e^{+ik_-x} |\downarrow\rangle . \quad (7.43)$$

Em virtude deste aspecto, o feixe coletado no outro contato ferromagnético terá polarização por spin diferente daquela do feixe incidente. Esta defasagem estará portanto relacionada ao *shift* $k_+ - k_-$ entre os vetores de onda após a recombinação do feixe de elétrons no coletor ferromagnético. Nossa proposta nesta seção consiste em calcular este *shift* estabelecendo as devidas condições de contorno para os espinores $\Psi|_{x<0}$ e $\Psi|_{x>0}$ no ponto $x = 0$ onde há o espalhamento do feixe de elétrons incidente, determinando sua dependência com parâmetros diretamente ligados ao poço quântico. Muito embora este problema envolva a dinâmica do transporte de elétrons e dependa do tempo, lidaremos apenas com sua versão estática, estudando o espalhamento do feixe de elétrons em um dado instante qualquer.

A condição de contorno mais simples diz respeito a continuidade dos espinores $\Psi|_{x<0}$ e $\Psi|_{x>0}$ no ponto $x = 0$, ou seja,

$$\Psi|_{x=0^-} = \Psi|_{x=0^+} . \quad (7.44)$$

Substituindo (7.40) e (7.43) nesta equação, encontramos o par de igualdades

$$A_+ + A_- = \sqrt{2}B_+ , \quad (7.45)$$

$$A_+ + A_- = \sqrt{2}C_+ . \quad (7.46)$$

A segunda condição de contorno se refere a derivada dos espinores $\Psi|_{x<0}$ e $\Psi|_{x>0}$ no ponto $x = 0$. Uma vez que estamos trabalhando com espinores, a derivada de Ψ é dada em termos do operador velocidade v_x ,

$$v_x \Psi|_{x=0^-} = v_x \Psi|_{x=0^+} . \quad (7.47)$$

Este operador, porém, assume formas distintas nas regiões $x < 0$ e $x > 0$ onde há a fonte ferromagnética e o gás bidimensional, respectivamente. Quanto a região $x > 0$, agora que dispomos da forma diagonal do hamiltoniano efetivo para uma subbanda podemos determinar facilmente o operador velocidade associado ao movimento do elétron na região da heteroestrutura semicondutora,

$$v_x = \frac{\partial}{\partial p_x} \left(T^{-1} \widetilde{H} T \right) = \left(\mathbf{1}_{2 \times 2} + \frac{m_{\parallel}}{M_{\parallel}} \sigma_z \right) \frac{p_x}{m_{\parallel}} , \quad (7.48)$$

onde as massas efetivas $m_{\parallel}$ e $M_{\parallel}$ são dadas nas equações (3.36) e (3.38), respectivamente. Resta agora calcular a velocidade do elétron na região do ferromagneto que injeta os elétrons com polarização de spin definida no gás bidimensional. Existem inúmeras maneiras de escrever o hamiltoniano que descreve este ferromagneto incluindo a magnetização (78). Entretanto, como o que nos interessa nesta descrição é a dependência com o momentum linear p_x , podemos supor o hamiltoniano de partícula livre

$$H_f = \left(\frac{p_x^2}{2m_0} + \frac{p_y^2}{2m_0} \right) \mathbf{1}_{2 \times 2} , \quad (7.49)$$

onde m_0 é a massa do elétron. Naturalmente, o operador velocidade na região do ferromagneto assume então a forma diagonal

$$v_{x,f} = \frac{\partial}{\partial p_x} H_f = \frac{p_x}{m_0} \mathbf{1}_{2 \times 2} . \quad (7.50)$$

Assim, substituindo (7.40), (7.43), (7.48) e (7.50) na equação (7.47), dispomos das novas

identidades

$$m_{\parallel}k_F (A_+ - A_-) = \sqrt{2}m_0 \left(1 + \frac{m_{\parallel}}{M_{\parallel}}\right) k_+ B_+ , \quad (7.51)$$

$$m_{\parallel}k_F (A_+ - A_-) = \sqrt{2}m_0 \left(1 - \frac{m_{\parallel}}{M_{\parallel}}\right) k_+ C_+ . \quad (7.52)$$

Através de manipulações algébricas muito simples, o conjunto de equações (7.45) e (7.51) pode ser rearranjado de forma a escrever os coeficientes $A_{\pm}$ em termos de B_+ e C_+ , a saber,

$$A_+ = \frac{m_{\parallel}k_F + m_0\tau_+k_+}{\sqrt{2}m_{\parallel}k_F} B_+ = \frac{m_{\parallel}k_F + m_0\tau_-k_-}{\sqrt{2}m_{\parallel}k_F} C_+ , \quad (7.53)$$

e ainda

$$A_- = \frac{m_{\parallel}k_F - m_0\tau_+k_+}{\sqrt{2}m_{\parallel}k_F} B_+ = \frac{m_{\parallel}k_F - m_0\tau_-k_-}{\sqrt{2}m_{\parallel}k_F} C_+ , \quad (7.54)$$

onde $\tau_{\pm} = 1 \pm m_{\parallel}/M_{\parallel}$. Estas igualdades nos levam a concluir que $B_+ = C_+$ e $\tau_+k_+ = \tau_-k_-$, ou seja, o *shift* entre os vetores de onda no gás bidimensional resulta em

$$k_+ - k_- = -2 \frac{m_{\parallel}}{M_{\parallel}} \frac{k_+}{\tau_-} , \quad (7.55)$$

o que garante a continuidade da densidade de corrente em $x = 0$. Tendo em vista que reduzimos a injeção do feixe de elétrons a um típico problema de espalhamento, nada mais natural que determinar os coeficientes de reflexão e transmissão da onda espalhada. Assim, começando pelo coeficiente de reflexão,

$$R = \frac{A_-^2}{A_+^2} = \frac{(m_{\parallel}k_F - m_0\tau_+k_+)^2}{(m_{\parallel}k_F + m_0\tau_+k_+)^2} = \frac{(m_{\parallel}k_F - m_0\tau_-k_-)^2}{(m_{\parallel}k_F + m_0\tau_-k_-)^2} . \quad (7.56)$$

Analogamente, o coeficiente de transmissão segue da conservação de probabilidade, $T = 1 - R$, a saber,

$$T = \frac{4m_0m_{\parallel}k_F\tau_+k_+}{(m_{\parallel}k_F + m_0\tau_+k_+)^2} . \quad (7.57)$$

Um caso interessante envolvendo a injeção do feixe de elétrons via descrição do problema de espalhamento é dado quando o coeficiente de reflexão é nulo. Em outras palavras, se não há reflexão, ou seja, $R = 0$, então a partir da equação (7.56) devemos ter

$$k_{\pm} = \frac{m_{\parallel}k_F}{m_0\tau_{\pm}} . \quad (7.58)$$

Mas agora este resultado nos permite determinar o *shift* entre os vetores de onda após o espalhamento do elétron no contato entre o ferromagneto e a heteroestrutura semicondutora. Para tanto, basta inserí-lo na equação (7.55),

$$k_+ - k_- = -2 \frac{m_{||}}{m_0} \frac{k_F}{\tau_+ \tau_-} = \frac{2m_{||}^2 M_{||} k_F}{m_0 (m_{||}^2 - M_{||}^2)} . \quad (7.59)$$

A primeira característica deste resultado está na dependência linear com o vetor de onda de Fermi k_F . Ademais, o leitor pode constatar através das equações (3.36) e (3.38) que definem as massas efetivas $m_{||}$ e $M_{||}$ a independência do *shift* com o parâmetro de Kane P_2 , dependendo exclusivamente do parâmetro de Kane P_1 . De maneira geral, a equação (7.59) é função do gap E_g , do *split-off* do campo cristalino Δ_c e do acoplamento spin-órbita Δ_{so} . É importante ressaltar que o caso $R = 0$, ou seja, a ausência de reflexão durante a injeção de elétrons com polarização de spin definida do ferromagneto para o gás bidimensional no canal semiconductor, realmente consiste uma idealização. De fato, dificuldades envolvendo a qualidade dos materiais semicondutores utilizados como canal e a eficiência dos contatos ferromagnéticos na interface entre estas estruturas interfere na injeção dos elétrons e ainda é motivo de grande preocupação da pesquisa em spintrônica (3).

Figura 7.4 – *Shift* entre os vetores de onda após o espalhamento do elétron no contato entre o ferromagneto e a heteroestrutura semicondutora para o InAs e InP. Apenas por simplicidade, aqui plotamos o módulo $|k_+ - k_-|$ da equação (7.59). Na figura 7.4(a) construímos este *shift* em função do vetor de onda de Fermi k_F no âmbito da parametrização cúbica onde $\vartheta = 0$, ou seja, $\bar{P}_1 = P_1$. Diferentemente, a figura 7.4(b) mostra o módulo do *shift* em função do ângulo ϑ da parametrização quase-cúbica, ou seja, $\bar{P}_1 = P_1 \cos \vartheta$, tomando o caso em que $k_F = 0.413 \text{ nm}^{-1}$ (7).

No intuito de analisar as intensidades do resultado mostrado em (7.59), a figura 7.4 mostra o *shift* entre os vetores de onda após o espalhamento do elétron no contato entre

o ferromagneto e a heteroestrutura semicondutora para o InAs e InP. Apenas por simplicidade, aqui plotamos o módulo $|k_+ - k_-|$ desta equação. Os gaps $(E_g, \Delta_c, \Delta_{so})$ e o parâmetro de Kane P_1 destes materiais podem ser consultados na tabela 6.1. Na figura 7.4(a) construímos este *shift* em função do vetor de onda de Fermi k_F no âmbito da parametrização cúbica onde $\vartheta = 0$, ou seja, $\bar{P}_1 = P_1$. Como comentado, o *shift* $|k_+ - k_-|$ varia linearmente em função do vetor de onda de Fermi. Muito embora as intensidades sejam bem diferentes entre o InAs e o InP devido a sutil diferença entre seus gaps E_g , o *shift* em ambos materiais é da ordem de 10^{-3} nm^{-1} .

Por outro lado, a figura 7.4(b) mostra o módulo do *shift* em função do ângulo ϑ da parametrização quase-cúbica, ou seja, $\bar{P}_1 = P_1 \cos \vartheta$, tomando o caso em que $k_F = 0.413 \text{ nm}^{-1}$ de acordo com a referência (7). Ainda que a massa efetiva $1/m_{\parallel}$ dependa do parâmetro de Kane $\bar{P}_1$, o comportamento puramente harmônico do *shift* é devido ao fato de que a massa efetiva $1/M_{\parallel}$ é diretamente proporcional a este parâmetro, ou seja, varia com a função $\cos \vartheta$ justificando os mínimos em 90° e 270° . Isto pode ser verificado diretamente através das equações (3.36) e (3.38). Novamente, as diferenças nas amplitudes do *shift* são devidas aos valores do gap E_g em cada material. Como indicado em (7.59), estas amplitudes são ainda moduladas pelo vetor de onda de Fermi k_F . Tanto o InAs quanto o InP apresentam *shift* $|k_+ - k_-|$ na faixa de 10^{-3} nm^{-1} . Comparando os resultados apresentados na figura 7.4 com dados experimentais, a referência (7) utiliza o InAs para formar o canal semicondutor do transistor Datta-Das escolhendo o caso em que a distância entre os ferromagnetos, ou seja, a largura L do poço quântico, é igual a $1.25 \mu\text{m}$ e $1.65 \mu\text{m}$. Cada um dos referidos valores para a separação dos ferromagnetos está relacionado a comprimentos de onda em dimensões típicas daquelas usadas atualmente na indústria de litografia (76). Se o spin dos elétrons injetados no canal semicondutor pela fonte precessa sob um ângulo de $\pi^\ddagger$, o *shift* calculado para $L = 1.25 \mu\text{m}$ e $L = 1.65 \mu\text{m}$ é dado, respectivamente, por $|k_+ - k_-| = \pi/L \approx 2.51 \times 10^{-3} \text{ nm}^{-1}$ e $|k_+ - k_-| = \pi/L \approx 1.91 \times 10^{-3} \text{ nm}^{-1}$. Independentemente das amplitudes medidas, cada *shift* tem a mesma ordem de grandeza quando comparados àqueles mostrados nas figuras 7.4(a) e 7.4(b).

[‡]Em outras palavras, o ângulo entre as orientações do vetor de spin final e inicial é igual a π .

Capítulo 8

Conclusões e perspectivas

Esta dissertação está voltada ao estudo da estrutura eletrônica de materiais semicondutores que se cristalizam na rede wurtzita, tendo em vista o caso *bulk* e a heteroestrutura. Explorando as simetrias da rede cristalina da wurtzita, em particular identificando sua estrutura de bandas às representações irredutíveis do grupo pontual C_{6v} do vetor de onda no centro da zona de Brillouin, mostramos como construir a matriz de Kane 8×8 passo a passo. Em particular, nosso tratamento algébrico tem um caráter um pouco mais geral frente aquele reportado na literatura (21, 38, 44) pois levamos em conta os efeitos do acoplamento mediado por spin entre as bandas de condução e *split-off* do campo cristalino. Neste ambiente, a base de oito estados que caracteriza o modelo de Kane 8×8 é obtida diagonalizando exatamente a matriz da interação spin-órbita e fornece um tratamento unificado entre os sistemas hexagonal e cúbico, o que pode ser muito útil no estudo de politipismos. Como mostramos na seção 2.4.1, a presença do acoplamento entre as bandas de condução e *split-off* do campo cristalino no hamiltoniano de Kane 8×8 sugere naturalmente uma parametrização trigonométrica em função do ângulo ϑ (vide equação (2.51)) que vincule este e aquele acoplamento entre as bandas de valência e *split-off* do campo cristalino ao acoplamento intrabanda de valência mediado por spin. A este resultado designamos o título de parametrização quase-cúbica já que, tomando o caso $\vartheta = 0$, recobramos exatamente as mesmas energias do sistema cúbico (31, 42). Em face das simetrias (ou a falta delas) da rede hexagonal, conclui-se que a interação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ é responsável pela inclusão de um novo parâmetro de Kane frente ao caso cúbico. Nitidamente, este

termo emerge da interação entre a banda de condução e o fundo da banda de valência intimamente ligada ao acoplamento spin-órbita.

Tendo em vista a parametrização quase-cúbica definida na seção 2.4.1, mostramos que é possível separar a matriz de Kane em blocos matriciais que expressam os acoplamentos entre as bandas de condução e valência. Esta representação é útil já que, através do *folding down*, conseguimos transformar o hamiltoniano de Kane 8×8 numa matriz de dimensão 2×2 que descreve a banda de condução, desacoplando-a das demais componentes espinoriais relativas à banda de valência. Uma vez que a equação associada a esta nova matriz não define um problema de autovalor tendo em vista o comportamento não-linear das energias do sistema, via um processo de linearização obtemos uma equação efetiva em ordens no inverso do gap de energia do semiconductor.

O hamiltoniano efetivo em primeira ordem no inverso do gap de energia na heteroestrutura apresenta uma interação dependente em spin na forma do operador helicidade no plano, resultado não observado no caso cúbico (24, 42). No que se refere a monoestrutura, além da dependência em spin no operador helicidade, o hamiltoniano efetivo possui ainda uma contribuição semelhante a interação spin-órbita de Rashba. Esta interação está diretamente ligada a correções em segunda ordem no inverso do gap de energia vindas do bloco H_v da banda de valência na parametrização quase-cúbica do hamiltoniano de Kane. Se tomarmos a parametrização cúbica, esta interação em spin bem como as correções em segunda ordem desaparecem do hamiltoniano efetivo. Mais ainda, se o potencial estrutural do poço é nulo e a componente k_z do vetor de onda deixa de ser um operador diferencial assumindo um caráter estritamente numérico, então nesta parametrização a equação efetiva obtida para a heteroestrutura recobra exatamente aquela do semiconductor na fase *bulk*. Como vimos no capítulo 3, tanto na heteroestrutura quanto na monoestrutura surgem as mesmas massas efetivas dependentes em spin como funções dos gaps E_g , Δ_c e Δ_{so} .

Quanto às soluções da equação efetiva para banda de condução, na monoestrutura a relação de dispersão se abre em dois ramos de energia devido a degenerescência por spin. Se o *splitting* nas energias é conhecido experimentalmente, mostramos que é possível

determinar analiticamente o parâmetro de Kane P_2 . O elétron pode popular dois estados distintos dependentes de uma fase imaginária ligada diretamente as correções em segunda ordem no hamiltoniano efetivo. Caso estas correções sejam nulas, então este fator de fase desaparece e os autoestados passam a ser reais.

No âmbito da heteroestrutura, se o poço comporta apenas uma subbanda, a relação de dispersão se abre em dois parabolóides de revolução no espaço de momentos devido a multiplicidade por spin. Além disso, o *spin splitting* nas energias é puramente quadrático e diferente de zero para o caso em que $k_{||} = 0$, resultados completamente diferentes daqueles observados no sistema cúbico (22). Outra novidade está nos vetores de polarização por spin que são perpendiculares às superfícies de energia, enquanto no sistema cúbico os mesmos são tangentes às superfícies de energia. Pela discrepância em seus gaps, escolhemos os semicondutores InAs e InP para simular numericamente os resultados obtidos para a relação de dispersão da banda de condução. No limite da parametrização cúbica da seção 2.4.2, verifica-se que além das intensidades das energias serem maiores no InAs, o *splitting* devido a spin na banda de condução é bem mais evidente do que aquele observado no InP. Notadamente, se voltarmos ao caso da parametrização quase-cúbica, o que se observa é que as intensidades nas energias de ambos semicondutores aumentam à medida que o ângulo ϑ aumenta, muito embora este acréscimo ainda seja limitado superiormente pela intensidade das energias no caso $\vartheta = 0$.

Nos restringindo ao poço quântico simétrico, vimos que a relação de dispersão do modelo de duas subbandas se desdobra em quatro níveis de energia classificados pela multiplicidade por spin e pelo número de autofunções do poço. Estas energias guardam informações diretas da interação dependente em spin no hamiltoniano efetivo através do acoplamento $|\eta_{01}|$ dado na equação (4.29). O sistema cúbico exibe um termo ligeiramente semelhante a este (24, 42), muito embora represente o elemento de matriz da derivada do potencial estrutural do poço quântico na respectiva base de estados que não ocorre no sistema hexagonal. Tomando o caso $k_{||} = 0$, o *splitting* devido a spin na relação de dispersão passa a ser função da diferença das energias do poço quântico e dos acoplamentos intrasubbanda β_{00} e β_{11} fornecidos em (4.24).

Manipulando algebricamente a equação secular da matriz de Kane 8×8 do semiconductor na fase *bulk*, determinamos uma forma fechada para cada um de seus coeficientes que dependem das componentes do vetor de onda. Como um exemplo prático, tomamos os gaps de energia do InAs e calculamos sua estrutura eletrônica via solução numérica deste polinômio. As intensidades das energias observadas estão de acordo com aquelas reportadas em (53). Voltando a atenção exclusivamente para a banda de condução, observamos que para valores das componentes do vetor de onda nos intervalos $0 \leq k_{||} \leq 0.30 \text{ nm}^{-1}$ e $|k_z| \leq 0.30 \text{ nm}^{-1}$ os resultados analítico e numérico concordam com desvio relativo de até 10%. Isto se reflete em dois aspectos. O primeiro se refere a essência do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, cuja prescrição garante a estrutura de bandas do material semiconductor em torno do ponto Γ no centro da cela unitária. O segundo se refere a precisão e consistência da linearização nos denominadores de energia, as quais são válidas em torno de $k = 0$. Do ponto de vista experimental (61, 62), $k < 0.3 \text{ nm}^{-1}$, o que justifica plenamente nossas aproximações. Muito embora tenhamos escolhido os parâmetros de Kane P_1 e P_2 iguais na simulação numérica, observa-se que variações em P_2 se refletem diretamente nas intensidades das energias na estrutura de bandas do material, para mais ou para menos.

Seguindo a prescrição do *folding down* e mantendo apenas termos lineares no potencial vetor $\mathbf{A}$, a equação efetiva para a banda de condução na presença do campo de radiação pode ser dividida em duas contribuições. A primeira representa o próprio hamiltoniano efetivo do elétron de condução na ausência de campos externos. A segunda apresenta a assinatura do acoplamento elétron-fóton através de produtos entre as componentes do vetor de onda e potencial vetor $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{A})$, interação análoga àquela que emerge naturalmente na equação de Pauli via o acoplamento mínimo. Desenvolvemos o cálculo das taxas de transição ópticas via a absorção de um fóton pelo elétron de condução para a monoestrutura e o modelo de subbandas. Na monoestrutura há três possíveis contribuições distintas para a taxa de transição óptica relacionadas a direção de incidência do fóton através do ângulo φ . Um dos termos é responsável por transições devido a spin *in plane*, ou seja, transições no plano perpendicular a direção z de crescimento da estrutura semicondutora. Os demais associam transições devido a spin na direção paralela ao eixo z . Dados os

semicondutores InAs e InP e selecionando alguns valores para as componentes do vetor de onda, vimos que a taxa de transição óptica varia harmonicamente com o ângulo de incidência. Fixando o ângulo de incidência do fóton, a taxa de transição tem uma ressonância em torno de $k_z = 0$ à medida que aumentamos o valor da componente $k_{||}$ do vetor de onda no plano. No caso do poço quântico com uma subbanda, mostramos que transições ópticas com spin *flip* no plano do gás bidimensional são descartadas. Quando o poço quântico simétrico comporta duas subbandas, na ausência de spin *flip* a taxa de transição óptica é não-nula caso o fóton incida na direção paralela ao eixo z de crescimento do poço quântico. Em contraste, na presença de spin *flip* a taxa de transição óptica é diferente de zero apenas quando o fóton incide perpendicularmente ao eixo de crescimento do poço. Dado que as transições ópticas induzem a mudança na orientação do spin eletrônico, estes resultados podem ser úteis no desenvolvimento de novos dispositivos optoeletrônicos ou spintrônicos onde o semiconductor de rede wurtzita desempenha papel central. Em termos puramente qualitativos, as expressões analíticas para as taxas de transição ópticas em poços quânticos com uma e duas subbandas estão relacionadas a emergência do efeito spintrônico conhecido como fotocorrente de spin ou efeito fotogalvânico circular (CPGE) reportado em (29).

Quanto à dinâmica do elétron na subbanda de condução, verificamos que a evolução temporal do operador posição não apresenta o efeito *Zitterbewegung*, o que não acontece com a evolução temporal das componentes do operador de spin que exibem o mesmo comportamento oscilatório previsto por Schrödinger (45). Conforme mostramos, o elétron apresenta um movimento retilíneo no plano xy . É importante deixar claro que este resultado pode não ser mais válido se incluirmos no hamiltoniano efetivo correções em segunda ordem no inverso do gap de energia. Mesmo para o caso de uma subbanda, a presença destas contribuições pode gerar dependências harmônicas vindas da evolução temporal do operador posição. Considerando a injeção de elétrons com spins polarizados sob um ângulo de 45° , a dependência linear do valor esperado do operador posição garante que os valores esperados das componentes do operador de spin sejam campos harmônicos com período 2π . Uma vez que a separação entre os spins é da ordem de poucos nanômetros,

este efeito de precessão do spin do elétron sugere naturalmente a construção de grades de difração (68). Ademais, o padrão de precessão dos spins de elétrons injetados no gás bidimensional confinado no poço quântico é igual àquele observado nas referências (67, 77). Estas referências atribuem a este fenômeno de precessão dos spins o título *persistent spin helix* (PSH) (76) que, aqui, acreditamos ser uma consequência do efeito *Zitterbewegung*.

Considerando o transistor Datta-Das formado por redes wurtzita, calculamos ainda o *shift* $k_+ - k_-$ no vetor de onda de elétrons injetados no canal semiconductor deste dispositivo. A idéia é que, após o espalhamento destes portadores no contato entre o ferromagneto e o gás bidimensional confinado no poço quântico da heteroestrutura, o feixe de elétrons coletado terá polarização por spin diferente daquela do feixe incidente. Além de variar linearmente com o vetor de onda de Fermi k_F , a equação (7.59) mostra que o *shift* é função dos gaps $(E_g, \Delta_c, \Delta_{so})$ e do parâmetro de Kane P_1 , independentemente de P_2 . Escolhendo os semicondutores InAs e InP mostramos que, embora as amplitudes deste *shift* sejam distintas em ambos materiais devido a diferença dos respectivos gaps E_g , $k_+ - k_-$ varia na ordem de 10^{-3} nm^{-1} . Tratando particularmente do InAs, este resultado está de acordo com os dados experimentais fornecidos na referência (7). Se o spin dos elétrons injetados neste canal pela fonte precessa sob um ângulo de π então, independentemente das amplitudes medidas para $k_+ - k_-$, cada *shift* tem a mesma ordem de grandeza 10^{-3} nm^{-1} dos resultados que encontramos.

Dentre as perspectivas de trabalhos futuros, o passo mais natural em sequência aos cálculos desenvolvidos nesta dissertação consiste em incluir as correções em segunda ordem no hamiltoniano efetivo. Fazendo isto, listamos a seguir um conjunto de propostas que podem ser colocadas em prática:

1. Estudar o novo modelo de subbandas que emerge a partir das correções em segunda ordem e reformular todo o estudo das transições ópticas neste contexto.
2. Partindo de um dado grupo de poços quânticos, em particular aqueles formados por InAs, InSb, InP e InN, analisar numericamente a relação de dispersão nos modelos de uma e duas subbandas, além das respectivas taxas de transição óptica associadas a estes modelos.

3. Calcular a evolução temporal dos operadores de posição e spin a partir do modelo de subbandas que inclui a correção de segunda ordem e analisar se o efeito *Zitterbewegung* ainda persiste. Estudar ainda o transistor Datta-Das à luz das mesmas correções na linearização dos denominadores de energia.
4. Os resultados apresentados nesta dissertação são baseados em modelos efetivos na estrutura de bandas de um cristal de wurtzita ideal. Na prática, sabemos que sempre há imperfeições na rede e estes defeitos podem interferir no espectro do semiconductor. Assim, um exercício interessante consiste em refazer todo o modelo de Kane 8×8 incluindo os efeitos de *strain*. Ao final, verificar quais são as modificações que este efeito induz.
5. Estudar o efeito Hall quântico (79) a partir do modelo de subbandas em primeira ordem no inverso do gap de energia e, a partir dos resultados encontrados, analisar o que se modifica devido a inclusão dos efeitos de segunda ordem nas energias. Muito embora nosso estudo das propriedades ópticas do semiconductor de rede wurtzita tenha se limitado ao cálculo das taxas de transição devido a absorção de um fóton, podemos naturalmente promover um estudo da função dielétrica e da condutividade no espírito da referência (80).
6. Calcular a fase de Berry dos autoestados do hamiltoniano efetivo no modelo de subbandas. A idéia é tentar relacionar estes resultados com aqueles que reportam acerca de estados de borda topologicamente protegidos (81).
7. A partir da crescente importância dada ao estudo de grafenos, refazer todo o modelo de Kane 8×8 para o semiconductor de rede wurtzita tendo como referência no método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ o ponto especial K da primeira zona de Brillouin. Neste ponto, a relação de dispersão da wurtzita tem correlação direta àquela observada no grafeno. Comparar os autoestados do hamiltoniano efetivo da banda de condução vindos desta nova formulação com aqueles obtidos no ponto Γ .

REFERÊNCIAS

- 1 YUAN, Z.; CHEN, Z.; CUI, D.; MA, J.; HU, Q.; ZHOU, J.; ZHOU, Y. Normal incidence photoresponse in GaAs/AlGaAs quantum well infrared photodetector. **Applied Physics Letters**, New York, v. 67, n. 7, p. 930-931, 1995. DOI:10.1063/1.114698

- 2 WOLF, S. A.; AWSCHALOM, D. D.; BUHRMAN, J. M.; DAUGHTON, S.; ROUKES, M. L.; CHTCHELKANOVA, A. Y.; TREGER, D. M. Spintronics: a spin-based electronics vision for the future. **Science**, Washington, v. 294, n. 5546, p. 1488–1495, 2001. DOI:10.1126/science.1065389

- 3 ŽUTIĆ, I.; FABIAN, J.; DAS SARMA, S. Spintronics: fundamentals and applications. **Reviews of Modern Physics**, College Park, v. 76, n. 2, p. 323–410, 2004. DOI:10.1103/RevModPhys.76.323

- 4 BADER, S. D.; PARKIN, S. S. P. Spintronics. **Annual Review of Condensed Matter Physics**, Palo Alto, v. 1, p. 71–88, 2010. DOI: 10.1146/annurev-conmatphys-070909-104123. DOI:10.1146/annurev-conmatphys-070909-104123

- 5 BAIBICH, M. N.; BROTO, J. M.; FERT, A.; NGUYEN VAN DAU, F.; PETROFF, F.; ETIENNE, P.; CREUZET, G.; FRIEDERICH, A.; CHAZELAS, J. Giant magnetoresistance of (001)*Fe*/(001)*Cr* magnetic superlattices. **Physical Review Letters**, College Park, v. 61, n. 21, p. 2472–2475, 1988. DOI:10.1103/PhysRevLett.61.2472

- 6 DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. **Applied Physics Letters**, Woodbury, v. 56, n. 07, p. 665–667, 1990. DOI:10.1063/1.102730

- 7 KOO, H. C.; KWON, J. H.; EOM, J.; CHANG, J.; HAN, S. H.; JOHNSON, M. Control of spin precession in a spin-injected field effect transistor. **Science**, Washington, v. 235, n. 5947, p. 1515–1518, 2009. DOI:10.1126/science.1173667

- 8 KYRYCHENKO, F. V.; ULLRICH, C. A.; D'AMICO, I. Intersubband spin-orbit coupling and spin splitting in symmetric quantum wells. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Amsterdam, v. 321, n. 8, p. 944–948, 2009. DOI:10.1016/j.jmmm.2008.03.006

- 9 DE FARIA JUNIOR, P.; SIPAHI, G. M. Polytypic nanowhiskers: electronic properties in the vicinity of the band edges. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1012.0227v2>>. Acesso em: dez. 2012.

- 10 RAM-MOHAN, L. R.; YOO, K. H.; AGGARWAL, R. L. Transfer-matrix algorithm for the calculation of the band structure of semiconductor superlattices. **Physical Review B**, College Park, v. 38, n. 9, p. 6151–6159, 1988. DOI:10.1103/PhysRevB.38.6151

- 11 BJORKEN, J. D.; DRELL, S. D. **Relativistic quantum mechanics**. New York: McGraw-Hill, 1964.

- 12 GREINER, W. **Relativistic quantum mechanics**. Berlin: Springer, 1994.

- 13 ITZYKSON, C.; ZUBER, J. B. **Quantum field theory**. New York: McGraw-Hill, 1980.

- 14 CARTAN, E. **The theory of spinors**. New York: Dover Publications, 1981.

- 15 ALTMANN, S. L. **Rotations, quaternions and double groups**. New York: Dover Publications, 2005.

- 16 SAKURAI, J. J. **Advanced quantum mechanics**. 4th ed. California: Addison-Wesley, 1973.

- 17 GREINER, W. **Quantum mechanics: special chapters**. 2nd ed. New York: Springer, 2001.

- 18 TOMONAGA, S. **The story of spin**. Chicago: The University of Chicago Press, 1997.

-
- 19 ZAWADZKI, W. On the v^2/c^2 expansion of the Dirac equation with external potentials. **American Journal of Physics**, New York, v. 73, n. 8, p. 756–758, 2005. DOI:10.1119/1.1927548
- 20 CHEN, J. Q.; PING, J.; WANG, F. **Group representation theory for physicists**. 2nd ed. New Jersey: World Scientific, 2002.
- 21 DRESSELHAUS, G. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. **Physical Review**, College Park, v. 100, n. 2, p. 580–586, 1955. DOI:10.1103/PhysRev.100.580
- 22 BYCHKOV, Y. A.; RASHBA, E. I. Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy. **JETP Letters**, Moscow, v. 39, n. 2, p. 78–81, 1984.
- 23 BYCHKOV, Y. A.; RASHBA, E. I. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, Bristol, v. 17, n. 33, p. 6039–6045, 1984. DOI:10.1088/0022-3719/17/33/015
- 24 BERNARDES, E. S.; SCHLIEMANN, J.; LEE, M.; EGUES, J. C.; LOSS, D. Spin-orbit interaction in symmetric wells with two subbands. **Physical Review Letters**, College Park, v. 99, n. 07, p. 076603-1–076603-4, 2007. DOI:10.1103/PhysRevLett.99.076603
- 25 BERESFORD, R. Full-zone $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method of band structure calculation for wurtzite semiconductors. **Journal of Applied Physics**, College Park, v. 95, n. 11, p. 6216–6224, 2004. DOI:10.1063/1.1713043
- 26 NAKAMURA, S.; MUKAI, T.; SENOH, M. Candela-class high-brightness *InGaN/AlGaIn* double-heterostructure blue-light-emitting diodes. **Applied Physics Letters**, New York, v. 64, n. 13, p. 1-3, 1994. DOI:10.1063/1.111832
- 27 CHING, W. Y.; HARMON, B. N. Electronic structure of AlN. **Physical Review B**, College Park, v. 34, n. 8, p. 5305–5308, 1986. DOI:10.1103/PhysRevB.34.5305
- 28 YANG, X. H.; SCHMIDT, T. J.; SHAN, W.; SONG, J. J.; GOLDENBERG, B. Above room temperature near ultraviolet lasing from an optically pumped GaN film grown on sapphire. **Applied Physics Letters**, New York, v. 66, n. 1, p. 1-3, 1995. DOI:10.1063/1.114222

-
- 29 GANISHEV, S. D.; KETTERL, H.; PRETTL, W.; IVCHENKO E. L.; VOROBJEV, L. E. Circular photogalvanic effect induced by monopolar spin orientation in p-GaAs/AlGaAs multiple-quantum wells. **Applied Physics Letters**, New York, v. 77, n. 20, p. 1-3, 2000. DOI:10.1063/1.1326488
- 30 GLASSER, M. L. Symmetry properties of the wurtzite structure. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, Amsterdam, v. 10, n. 2-3, p. 229–241, 1959. DOI:10.1016/0022-3697(59)90080-0
- 31 KANE, E. O. The $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method. In: WILLARDSON, R. K.; BEER, A. C. (Ed.) **Semiconductors and semimetals**. New York: Academic Press, 1966. cap. 3, p. 75–100.
- 32 KANE, E. O. Energy band structure in p-type germanium and silicon. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, Amsterdam, v. 1, n. 1-2, p. 82–89, 1956. DOI:10.1016/0022-3697(56)90014-2
- 33 KANE, E. O. Band structure of indium antimonide. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, Amsterdam, v. 1, n. 4, p. 249–261, 1957. DOI:10.1016/0022-3697(56)90013-6
- 34 KANE, E. O. The semi-empirical approach to band structure. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, Amsterdam, v. 8, p. 38–44, 1959. DOI:10.1016/0022-3697(59)90269-0
- 35 PARMENTER, R. H. Symmetry properties of the energy bands of the zinc blende structure. **Physical Review**, College Park, v. 100, n. 2, p. 573–579, 1955. DOI:10.1103/PhysRev.100.573
- 36 RASHBA, E. I. Symmetry of energy bands in crystals of wurtzite type I: symmetry of bands disregarding spin-orbit interaction. **JETP Letters**, Moscow, v. 39, n. 2, p. 78–81, 1957.
- 37 SUZUKI, M.; UENOYAMA, T. Theoretical study of momentum matrix elements of GaN. **Japanese Journal of Applied Physics**, Japan, v. 35, n. 2A, p. 543–545, 1996. DOI:10.1143/JJAP.35.543

-
- 38 CHUANG, S. L.; CHANG, C. S. $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method for strained wurtzite semiconductors. **Physical Review B**, College Park, v. 54, n. 4, p. 2491–2504, 1996. DOI:10.1103/PhysRevB.54.2491
- 39 LUTTINGER, J. M.; KOHN, W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. **Physical Review**, College Park, v. 97, n. 4, p. 869–883, 1955. DOI:10.1103/PhysRev.97.869
- 40 BIR, G.; PIKUS, G. **Symmetry and strain-induced effects in semiconductors**. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1974.
- 41 CALSAVERINI, R. S. P. A. **Acoplamento spin-órbita inter-subbanda em heteroestruturas semicondutoras**. 2007. 97 p. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.
- 42 CALSAVERINI, R. S.; BERNARDES, E. S.; EGUES, J. C.; LOSS, D. Intersubband-induced spin orbit interactions in quantum wells. **Physical Review B**, College Park, v. 78, n. 15, p. 155313-1–155313-16, 2008. DOI:10.1103/PhysRevB.78.155313
- 43 MOSQUEIRO, T. S. **Transições ópticas em heteroestruturas semicondutoras zinblende com duas subbandas**. 2011. 160 p. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.
- 44 FABIAN, J.; MATOS-ABIAGUE, A.; ERTLER, C.; STANO, P.; ŽUTIĆ, I. Semiconductors spintronics. **Acta Physica Slovaca**, v. 57, n. 4–5, p. 1–907, 2007.
- 45 SCHRÖDINGER, E. Ueber die kraefftefreie Bewegung in der relativistischen Quantenmechanik. **Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften, Physikalisch-Mathematische Klasse. Preussische Akademie der Wissenschaften**, Berlin, v. 1930, p. 418–428, 1930.
- 46 ENDERLEIN, R.; HORING, N. J. M. **Fundamentals of semiconductor physics and devices**. New Jersey: World Scientific, 1997.
- 47 YU, P. Y.; CARDONA, M. **Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties**. 3rd ed. New York: Springer, 1982.

- 48 BERESTETSKII, V. P.; PITAEVSKII, L. P.; LIFSHITZ, E. M. **Quantum electrodynamics**. 2nd ed. New York: Pergamon Press, 1982.

- 49 MADELUNG, O. **Introduction to solid-state theory**. 3rd ed. Berlin: Springer, 1996.

- 50 LAX, M. **Symmetry principles in solid state and molecular physics**. New York: Dover Publications, 2001.

- 51 DUL, D. T.; KORECKI, P. Wavelet analysis of white beam x-ray fluorescence holograms: determination of lattice sites and imaging of local atomic structure. **New Journal of Physics**, College Park, v. 14, n. 11, p. 113044-1–113044-23, 2012. DOI:10.1088/1367-2630/14/11/113044

- 52 VURGAFTMAN, I.; MEYER, J. R.; RAM-MOHAN, L. R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. **Journal of Applied Physics**, Woodbury, v. 89, n. 11, p. 5815–5875, 2001. DOI:10.1063/1.1368156

- 53 DE, A.; PRYOR, C. E. Predicted band structures of III–V semiconductors in the wurtzite phase. **Physical Review B**, College Park, v. 81, n. 15, p. 155210-1–155210-13, 2010. DOI:10.1103/PhysRevB.81.155210

- 54 BASSANI, F. Methods of band calculations applicable to III–V compounds. In: WILLARDSON, R. K.; BEER, A. C. (Ed.) **Semiconductors and semimetals**. New York: Academic Press, 1966. cap. 2, p. 21–74.

- 55 STEEB, W. H. **Problems & solutions in theoretical & mathematical physics**. 2nd ed., New Jersey: World Scientific, 1982, v. 2.

- 56 BURT, M. G. The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures. **Journal of Physics: Condensed Matter**, Bristol, v. 4, n. 32, p. 6651–6690, 1992. DOI:10.1088/0953-8984/4/32/003

- 57 BASTARD, G. **Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures**. France: Les Éditions de Physique, 1988.

-
- 58 WINKLER, R. **Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems**. New York: Springer, 2003. (Springer Tracts in Modern Physics, v. 191).
- 59 WEISSBLUTH, M. **Photon-atom interactions**. New York: Academic Press, Inc., 1989.
- 60 SILVESTER, J. R. Determinants of block matrices. **The Mathematical Gazette**, Leicester, v. 84, n. 501, p. 460–467, 2000.
- 61 WOOD, D. M.; ZUNGER, A. Successes and failures of the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method: a direct assessment for GaAs/AlAs quantum structures. **Physical Review B**, College Park, v. 53, n. 12, p. 7949–7963, 1996. DOI:10.1103/PhysRevB.53.7949
- 62 WANG, L. W.; ZUNGER, A. Pseudopotential-based multiband $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method for ~ 250000 -atom nanostructure systems. **Physical Review B**, College Park, v. 54, n. 16, p. 11417–11435, 1996. DOI:10.1103/PhysRevB.54.11417
- 63 BARTOLO, B. **Optical interactions in solids**. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1968.
- 64 JACKSON, J. D. **Classical electrodynamics**. 3rd ed. California: John Wiley & Sons, Inc., 1999.
- 65 BARUT, A. O.; BRACKEN, A. J. Zitterbewegung and the internal geometry of the electron. **Physical Review D**, College Park, v. 23, n. 10, p. 2454–2463, 1981. DOI:10.1103/PhysRevD.23.2454
- 66 ZAWADZKI, W. Zitterbewegung and its effects on electrons in semiconductors. **Physical Review B**, College Park, v. 72, n. 8, p. 085217-1—085217-4, 2005. DOI:10.1103/PhysRevB.72.085217
- 67 KORALEK, J. D.; WEBER, C. P.; ORENSTEIN, J.; ZHANG, S. C.; MACK, S.; AWSCHALOM, D. D. Emergence of the persistent spin helix in semiconductor quantum wells. **Nature**, New York, v. 458, n. 7238, p. 610–613, 2009. DOI:10.1038/nature07871

- 68 LIU, M. H.; CHEN, K. W.; CHEN, S. H.; CHANG, C. R. Persistent spin helix in Rashba-Dresselhaus two-dimensional electron systems. **Physical Review B**, College Park, v. 74, n. 23, p. 235322-1–235322-6, 2006. DOI:10.1103/PhysRevB.74.235322
- 69 ZAWADZKI, W.; RUSIN, T. M. Zitterbewegung (trembling motion) of electrons in semiconductors: a review. **Journal of Physics: Condensed Matter**, New York, v. 23, n. 14, p. 143201-1—143201-19, 2011. DOI:10.1088/0953-8984/20/45/454208
- 70 HUANG, K. On the Zitterbewegung of the Dirac electron. **American Journal of Physics**, New York, v. 20, n. 8, p. 479–484, 1952. DOI:10.1119/1.1933296
- 71 HESTENES, D. The Zitterbewegung interpretation of quantum mechanics. **Foundations of Physics**. Arizona, v. 20, n. 10, p. 1213–1232, 1990. DOI:10.1007/BF01889466
- 72 VAISHNAV, J. Y.; CLARK, C. W. Observing Zitterbewegung with ultracold atoms. **Physical Review Letters**, College Park, v. 100, n. 15, p. 153002-1–153002-4, 2008. DOI:10.1103/PhysRevLett.100.153002
- 73 ENGELMAN, P.; VERTESI, T. Large Berry phases in layered graphene. **Physical Review B**, College Park, v. 78, n. 20, p. 205311-1–205311-7, 2008. DOI:10.1103/PhysRevB.78.205311
- 74 LURIE, D.; CREMER, S.; Zitterbewegung of quasiparticles in superconductors. **Physica**. Amsterdam, v. 50, n. 2, p. 224–240, 1970. DOI:10.1016/0031-8914(70)90004-2
- 75 SCHLIEMANN, J.; LOSS, D.; WESTERVELT, R. M. Zitterbewegung of electronic wave packets in III-V zinc-blende semiconductor quantum wells. **Physical Review Letters**, College Park, v. 94, n. 20, p. 206801-1–206801-4, 2005. DOI:10.1103/PhysRevLett.94.206801
- 76 BERNEVIG, B. A.; ORENSTEIN, J.; ZHANG, S. C. Exact SU(2) symmetry and persistent spin helix in a spin-orbit coupled system. **Physical Review Letters**, College Park, v. 97, n. 23, p. 236601-1–236601-4, 2006. DOI:10.1103/PhysRevLett.97.236601
- 77 LIU, M. H.; CHANG, C. R.; CHEN, S. H. Spin precession due to spin-orbit coupling in a two-dimensional electron gas with spin injection via ideal quantum point

contact. **Physical Review B**, College Park, v. 71, n. 15, p. 153305-1–153305-4, 2005. DOI:10.1103/PhysRevB.71.153305

78 MOLENKAMP, L. W.; SCHMIDT, G.; BAUER, G. E. W. Rashba Hamiltonian and electron transport. **Physical Review B**, College Park, v. 64, n. 12, p. 121202-1–121202-4, 2001. DOI:10.1103/PhysRevB.64.121202

79 KANE, C. L.; MELE, E. J. Z_2 topological order and the quantum spin hall effect. **Physical Review Letters**, College Park, v. 95, n. 14, p. 146802-1–146802-4, 2005. DOI:10.1103/PhysRevLett.95.146802

80 FALKOVSKY, L. A. InN dielectric function from the midinfrared to the visible range. **Physical Review B**, College Park, v. 79, n. 11, p. 113203-1–113203-4, 2009. DOI:10.1103/PhysRevB.79.113203

81 HASAN, M. Z. Berry's phase and quantization in topological insulators. **Physics**, College Park, v. 3, p. 62, 2010. DOI: 10.1103/Physics.3.62. DOI:10.1103/Physics.3.62

Apêndice A

Digressões sobre teoria de grupos

A.1 Regras de seleção

Nesta seção apresentaremos o teorema que nos permite calcular os elementos de matriz de cada termo do hamiltoniano de Kane no que se refere a sua projeção na base de estados degenerada por spin que estamos utilizando. Em resumo, para resolver este problema vamos explorar todas as possíveis simetrias envolvidas recorrendo a um teorema de suma importância no contexto da teoria de grupos. Apesar de toda sua simplicidade e robustez, curiosamente grande parte das referências versando sobre o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ sequer fazem qualquer alusão a este teorema, muitas vezes denotado como *regra de seleção* (30,50).

A essência do uso da teoria de grupos para resolver este problema está no fato de que não precisamos calcular cada elemento de matriz explicitamente. De fato, a partir da análise do produto tensorial das representações irredutíveis envolvidas conseguiremos saber quais elementos de matriz são identicamente nulos, conhecendo ainda a multiplicidade daqueles elementos que não se anulam mediante estes argumentos de simetria.

Sejam $\mathcal{D}^\mu$ e $\mathcal{D}^\nu$ duas representações irredutíveis de dimensões n_μ e n_ν , respectivamente, de um dado grupo pontual finito $\mathcal{G}$. O número de elementos do grupo, ou seja, a ordem de $\mathcal{G}$, será indicado por N . Cada elemento g do grupo está associado a uma particular transformação de simetria que deixa a cela unitária invariante. O conjunto destas

transformações inclui em sua maioria rotações, reflexões e translações. Vamos denotar por $\langle \mathbf{r} | \psi_i^\mu \rangle = \psi_i^\mu$, $i = 1, 2, \dots, h_\mu$, e $\langle \mathbf{r} | \psi_j^\nu \rangle = \psi_j^\nu$, $j = 1, 2, \dots, n_\nu$, o conjunto de funções que se transformam de acordo com cada representação irredutível mencionada. A ação da transformação de simetria g no conjunto completo de vetores de cada representação irredutível é caracterizada pela equação

$$|\psi_m^\mu\rangle = \sum_n \mathcal{D}_{nm}^\mu(g) |\psi_n^\mu\rangle. \quad (\text{A.1})$$

Nosso objetivo aqui consiste em analisar os elementos de matriz de um dado operador linear $\mathbf{T}$ de componentes T_k no espaço de Hilbert formado pelas funções ψ^μ e ψ^ν . As componentes T_k se transformam segundo uma dada representação irredutível $\mathcal{D}^\alpha$ do grupo $\mathcal{G}$,

$$gT_k g^{-1} = \sum_j \mathcal{D}_{jk}^\alpha(g) T_j. \quad (\text{A.2})$$

Os elementos de matriz das componentes T_k são

$$\langle \psi_l^\nu | T_k | \psi_m^\mu \rangle = \langle \psi_l^\nu | g^{-1} (gT_k g^{-1}) g | \psi_m^\mu \rangle. \quad (\text{A.3})$$

Conhecendo a ação da transformação de simetria em cada termo na equação anterior, temos

$$\langle \psi_l^\nu | T_k | \psi_m^\mu \rangle = \sum_{s,n} \sum_j \mathcal{D}_{sl}^\nu(g)^* \mathcal{D}_{jk}^\alpha(g) \mathcal{D}_{nm}^\mu(g) \langle \psi_s^\nu | T_j | \psi_n^\mu \rangle. \quad (\text{A.4})$$

Enquanto o lado direito desta equação é diretamente dependente da transformação de simetria g através dos elementos de matriz de cada representação irredutível do grupo $\mathcal{G}$, o mesmo não ocorre com o lado esquerdo. Consequentemente, a soma sobre todo $g \in \mathcal{G}$ apenas acrescentará ao lado esquerdo um fator multiplicativo proporcional ao número de elementos do grupo, ao passo que o lado direito passará a depender desta nova soma. Expressando matematicamente,

$$\langle \psi_l^\nu | T_k | \psi_m^\mu \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s,n} \sum_j \sum_{g \in \mathcal{G}} \mathcal{D}_{sl}^\nu(g)^* \mathcal{D}_{jk}^\alpha(g) \mathcal{D}_{nm}^\mu(g) \langle \psi_s^\nu | T_j | \psi_n^\mu \rangle. \quad (\text{A.5})$$

Pode ser facilmente mostrado a partir do *Lema de Schur* (40) que ao somarmos sobre todos os elementos $g \in \mathcal{G}$ as representações irredutíveis deste grupo satisfazem a relação

de ortogonalidade

$$\frac{1}{N} \sum_{g \in \mathcal{G}} \mathcal{D}_{ik}^{\alpha}(g) = \begin{cases} 0 & \text{para } \mathcal{D}^{\alpha} \neq \mathcal{D}^0, \\ 1 & \text{para } \mathcal{D}^{\alpha} = \mathcal{D}^0, \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

onde $\mathcal{D}^0$ caracteriza a representação irredutível unidimensional associada ao elemento identidade de qualquer grupo. Então o mesmo raciocínio vale para a equação (A.5). Em outras palavras, se o produto das três representações irredutíveis define uma nova representação irredutível, a soma sobre os elementos do grupo será não-nula se esta representação corresponde à identidade do grupo. A partir disso podemos estabelecer o importante teorema:

Teorema 1 *Os elementos de matriz $\langle \psi_m^{\mu} | T_k | \psi_l^{\nu} \rangle$ de um operador $\mathbf{T}$ se anulam por razões de simetria se, e somente se, o produto direto das representações irredutíveis $\mathcal{D}^{\mu*} \otimes \mathcal{D}^{\alpha} \otimes \mathcal{D}^{\nu}$ não contém a representação irredutível identidade $\mathcal{D}^0$ do grupo $\mathcal{G}$. Caso contrário, o número de elementos linearmente independentes em $\langle \psi_m^{\mu} | T_k | \psi_l^{\nu} \rangle$ será igual a multiplicidade da representação identidade no produto $\mathcal{D}^{\mu*} \otimes \mathcal{D}^{\alpha} \otimes \mathcal{D}^{\nu}$.*

Dadas as representações irredutíveis $\mathcal{D}^{\mu}$, $\mathcal{D}^{\alpha}$ e $\mathcal{D}^{\nu}$, o produto direto entre elas obedece a relação de comutatividade usual, a saber,

$$\mathcal{D}^{\mu*} \otimes \mathcal{D}^{\alpha} \otimes \mathcal{D}^{\nu} = \mathcal{D}^{\mu*} \otimes \mathcal{D}^{\nu} \otimes \mathcal{D}^{\alpha}. \quad (\text{A.7})$$

Em geral, o produto direto entre duas representações irredutíveis apresenta a identidade do grupo apenas para o caso em que são equivalentes*. Partindo desta condição e da comutatividade entre o produto direto das representações, segue que $\mathcal{D}_0$ será resultado do produto $\mathcal{D}^{\mu*} \otimes \mathcal{D}^{\alpha} \otimes \mathcal{D}^{\nu}$ se $\mathcal{D}^{\mu*} \otimes \mathcal{D}^{\nu}$ contiver a representação $\mathcal{D}^{\alpha}$ (46).

*Apenas para relembrar, duas representações irredutíveis são equivalentes se podem ser conectadas por uma transformação de similaridade, ou seja,

$$\mathcal{D}^{\mu} = S^{-1} \mathcal{D}^{\alpha} S, \quad (\text{A.8})$$

onde S é uma matriz unitária.

A.2 A ação dos elementos de simetria do grupo C_{6v}

Nesta seção mostraremos brevemente a ação dos elementos de simetria do grupo pontual C_{6v} nos vetores da base $\{|x\rangle, |y\rangle\}$. Em particular, utilizando a equação (2.21) que especifica as simetrias de rotação do hexágono através de matrizes, temos

$$C_6^0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad C_6^1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 1 \end{bmatrix}, \quad C_6^2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.9})$$

$$C_6^3 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad C_6^4 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}, \quad C_6^5 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

Analogamente, podemos representar através da equação (2.23) as simetrias de reflexão do grupo pontual C_{6v} ,

$$\sigma_0 = \sigma_{d1} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_1 = \sigma_{v1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \sigma_{d2} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.11})$$

$$\sigma_3 = \sigma_{v2} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_4 = \sigma_{d3} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_5 = \sigma_{v3} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.12})$$

É importante frisar ao leitor que cada uma destas operações de simetria, tanto rotações quanto reflexões, estão ilustradas nas figuras 2.4 e 2.5, respectivamente. Esquecendo a coordenada z que é invariante a qualquer transformação de simetria do grupo C_{6v} , os vetores $|x\rangle$ e $|y\rangle$ são dados por

$$|x\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |y\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.13})$$

Vamos tomar como exemplo inicial a rotação C_6^1 que, evidentemente, gera todas as demais rotações do grupo, e atuar nestes vetores,

$$C_6^1|x\rangle = +\frac{1}{2}|x\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|y\rangle, \quad C_6^1|y\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2}|x\rangle + \frac{1}{2}|y\rangle. \quad (\text{A.14})$$

Procedendo da mesma forma para as reflexões σ_{v1} e σ_{d1} , temos as igualdades

$$\sigma_{v1}|x\rangle = -|x\rangle, \quad \sigma_{v1}|y\rangle = +|y\rangle, \quad \sigma_{d1}|x\rangle = +|x\rangle, \quad \sigma_{d1}|y\rangle = -|y\rangle. \quad (\text{A.15})$$

Também podemos calcular a ação dos elementos do grupo C_{6v} em relação a um pseudo-vetor. Por exemplo, as componentes do operador momentum angular de spin $\mathbf{S}$, ou seja, $S_x \sim |y\rangle|z\rangle - |z\rangle|y\rangle$, $S_y \sim |z\rangle|x\rangle - |x\rangle|z\rangle$ e $S_z \sim |x\rangle|y\rangle - |y\rangle|x\rangle$, onde o símbolo $\sim$ significa “se transforma como”, representam pseudo-vetores[†]. Muito embora a componente S_z seja invariante a qualquer rotação, o mesmo não acontece com S_x e S_y ,

$$C_6^1 S_x = +\frac{1}{2}S_x + \frac{\sqrt{3}}{2}S_y, \quad C_6^1 S_y = -\frac{\sqrt{3}}{2}S_x + \frac{1}{2}S_y. \quad (\text{A.16})$$

A mesma coisa acontece com as reflexões,

$$\sigma_{v1}S_x = +S_x, \quad \sigma_{v1}S_y = -S_y, \quad \sigma_{d1}S_x = -S_x, \quad \sigma_{d1}S_y = +S_y. \quad (\text{A.17})$$

Como estes três elementos de simetria geram todo o grupo C_{6v} , $\{S_x, S_y\}$ define uma base para a representação vetorial E_1 . Para verificar isso, basta calcular o traço das matrizes que as equações (A.16) e (A.17) representam. Para terminar, vamos analisar a ação das rotações e reflexões em S_z ,

$$C_6^1 S_z = S_z, \quad \sigma_{v1}S_z = -S_z, \quad \sigma_{d1}S_z = -S_z. \quad (\text{A.18})$$

O que se conclui, portanto, é que embora a componente z de um vetor se transforme segundo a representação irredutível escalar A_1 do grupo C_{6v} , a componente z de um pseudo-vetor se transforma de acordo com a representação irredutível pseudo-escalar[‡] A_2 deste mesmo grupo.

[†]Um pseudo-vetor representa uma quantidade que se transforma como um vetor mas muda de sinal devido a rotações impróprias.

[‡]Um pseudo-escalar define uma quantidade invariante sob rotações mas muda de sinal frente a simetrias de reflexão.

Apêndice B

Propriedades matriciais

B.1 A álgebra das matrizes $\mathbb{M}_l$

Nesta seção mostraremos como o bloco matricial H_{cv} do hamiltoniano de Kane pode ser escrito na forma dada em (3.4) através das matrizes $\mathbb{M}_l$ em (3.3). Para começar, seja a representação de H_{cv} em termos de blocos,

$$H_{cv} = \begin{bmatrix} \mathbb{M}_1 & \mathbb{M}_2 & \mathbb{M}_3 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

onde passaremos a definir

$$\mathbb{M}_1 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}\bar{P}_1k_+ & +\frac{2}{\sqrt{6}}P_2k_z \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}\bar{P}_1k_+ \end{bmatrix} = -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} k_+ + \frac{2P_2}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} k_z, \quad (\text{B.2})$$

$$\mathbb{M}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}}\bar{P}_1k_- & 0 \\ \frac{2}{\sqrt{6}}P_2k_z & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{P}_1k_+ \end{bmatrix} = -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} k_+ + \frac{2P_2}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} k_z, \quad (\text{B.3})$$

$$\mathbb{M}_3 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}}P_2k_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}\bar{P}_1k_- \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}\bar{P}_1k_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}P_2k_z \end{bmatrix} = -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{bmatrix} - \frac{P_2}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} k_z. \quad (\text{B.4})$$

Para simplificar estas equações, vamos definir o vetor $\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$, onde

$$M_x = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_y = -\frac{i}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_z = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.5})$$

e ainda o vetor $\mathbf{N} = (N_x, N_y, N_z)$ onde, analogamente,

$$N_x = +\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}, \quad N_y = -\frac{i}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}, \quad N_z = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.6})$$

Também definiremos o vetor $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ cujas componentes são dadas em termos das matrizes de Pauli em (2.4). Dadas as equações (B.5) e (B.6), vamos listar algumas propriedades dos produtos entre as componentes cartesianas dos vetores $\mathbf{M}$ e $\mathbf{N}$. Começando inicialmente pelos produtos $M_r M_r^\dagger$ e $N_r N_r^\dagger$, onde $r \in \{x, y, z\}$, temos

$$M_x M_x^\dagger = +\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_y M_y^\dagger = +\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_z M_z^\dagger = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.7})$$

$$N_x N_x^\dagger = +\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}, \quad N_y N_y^\dagger = +\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}, \quad N_z N_z^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.8})$$

Analogamente, para os produtos mistos da forma $M_r M_s^\dagger$ e $N_r N_s^\dagger$, onde $\{r, s\} \in \{x, y, z\}$, temos

$$M_x M_y^\dagger = -\frac{i}{4} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_x M_z^\dagger = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad M_y M_z^\dagger = -\frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.9})$$

$$N_x N_y^\dagger = +\frac{i}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}, \quad N_x N_z^\dagger = +\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad N_y N_z^\dagger = -\frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.10})$$

Como $\mathbf{k}_\parallel = (k_x, k_y)$ representa um vetor com componentes no plano xy , tomando o produto escalar com os vetores $\mathbf{M}$, $\mathbf{N}$ e σ obtemos os resultados

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{k}_\parallel = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} k_+, \quad \mathbf{N} \cdot \mathbf{k}_\parallel = +\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} k_-, \quad \sigma \cdot \mathbf{k}_\parallel = \begin{bmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.11})$$

onde definimos $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$. Substituindo a equação (B.11) nas equações (B.2)–(B.4), encontramos finalmente a representação reduzida dos blocos na matriz H_v , a saber,

$$\mathbb{M}_1 = +\frac{2\bar{P}_1}{\sqrt{6}}\mathbf{M}\cdot\mathbf{k}_{||} + \frac{2P_2}{\sqrt{6}}M_zk_z, \quad \mathbb{M}_2 = +\frac{2\bar{P}_1}{\sqrt{6}}\mathbf{N}\cdot\mathbf{k}_{||} + \frac{2P_2}{\sqrt{6}}N_zk_z, \quad \mathbb{M}_3 = -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{3}}\sigma\cdot\mathbf{k}_{||} - \frac{P_2}{\sqrt{3}}\sigma_zk_z. \quad (\text{B.12})$$

B.2 Os produtos $\mathbb{M}_i\mathbb{M}_l^\dagger$

Nosso objetivo nesta seção se resume em determinar os produtos entre as matrizes $\mathbb{M}_i$ e $\mathbb{M}_j$. Para tanto, faremos uso recorrente de alguns resultados apresentados na seção B.1. Considerando a equação (B.12), vamos começar calculando o produto matricial

$$\mathbb{M}_1\mathbb{M}_1^\dagger = \left(\frac{2\bar{P}_1}{\sqrt{6}}\mathbf{M}\cdot\mathbf{k}_{||} + \frac{2P_2}{\sqrt{6}}M_zk_z \right) \left(\frac{2\bar{P}_1}{\sqrt{6}}\mathbf{M}^\dagger\cdot\mathbf{k}_{||} + \frac{2P_2}{\sqrt{6}}N_zk_z \right), \quad (\text{B.13})$$

onde usamos o fato de que $M_z^\dagger = N_z$. Desenvolvendo todos os produtos possíveis e fazendo algumas simplificações algébricas imediatas, encontramos a equação

$$\mathbb{M}_1\mathbb{M}_1^\dagger = \frac{2\bar{P}_1^2}{3}(\mathbf{M}\cdot\mathbf{k}_{||})(\mathbf{M}^\dagger\cdot\mathbf{k}_{||}) + \frac{2P_2^2}{3}M_zN_zk_z^2 + \frac{2}{3}\bar{P}_1P_2(\mathbf{M}N_z + M_z\mathbf{M}^\dagger)\cdot\mathbf{k}_{||}k_z. \quad (\text{B.14})$$

Usando os produtos matriciais apresentados na seção anterior, a equação acima pode ser reescrita na forma

$$\mathbb{M}_1\mathbb{M}_1^\dagger = \frac{\bar{P}_1^2}{6} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} k_{||}^2 + \frac{2P_2^2}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} k_z^2 - \frac{\bar{P}_1P_2}{3} \begin{bmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{bmatrix} k_z, \quad (\text{B.15})$$

onde visando simplificar a notação definimos o módulo quadrado do vetor de onda no plano xy na forma $\mathbf{k}_{||}\cdot\mathbf{k}_{||} = k_{||}^2$. Vamos agora determinar o produto matricial que envolve o termo $\mathbb{M}_2$, repetindo todo o raciocínio desenvolvido até o presente momento. Desta forma,

$$\mathbb{M}_2\mathbb{M}_2^\dagger = \left(\frac{2\bar{P}_1}{\sqrt{6}}\mathbf{N}\cdot\mathbf{k}_{||} + \frac{2P_2}{\sqrt{6}}N_zk_z \right) \left(\frac{2\bar{P}_1}{\sqrt{6}}\mathbf{N}^\dagger\cdot\mathbf{k}_{||} + \frac{2P_2}{\sqrt{6}}M_zk_z \right). \quad (\text{B.16})$$

Substituindo o resultado apresentado em (B.12) na equação anterior e fazendo algumas simples manipulações algébricas, encontramos

$$\mathbb{M}_2 \mathbb{M}_2^\dagger = \frac{2\bar{P}_1^2}{3} (\mathbf{N} \cdot \mathbf{k}_\parallel) (\bar{N}^\dagger \cdot \mathbf{k}_\parallel) + \frac{2P_2^2}{3} N_z M_z k_z^2 + \frac{2}{3} \bar{P}_1 P_2 (\mathbf{N} M_z + N_z \mathbf{N}^\dagger) \cdot \mathbf{k}_\parallel k_z. \quad (\text{B.17})$$

Usando os produtos matriciais apresentados na seção anterior, esta equação pode ser reescrita imediatamente na forma

$$\mathbb{M}_2 \mathbb{M}_2^\dagger = \frac{\bar{P}_1^2}{6} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} k_\parallel^2 + \frac{2P_2^2}{3} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} k_z^2 + \frac{\bar{P}_1 P_2}{3} \begin{bmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{bmatrix} k_z. \quad (\text{B.18})$$

Por fim, não seria diferente o procedimento utilizado para determinar o produto matricial que envolve o termo $\mathbb{M}_3$. Seguiremos portanto a mesma linha de desenvolvimento algébrico, começando pela equação

$$\mathbb{M}_3 \mathbb{M}_3^\dagger = \left(\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{3}} \sigma \cdot \mathbf{k}_\parallel + \frac{P_2}{\sqrt{3}} \sigma_z k_z \right) \left(\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{3}} \sigma \cdot \mathbf{k}_\parallel + \frac{P_2}{\sqrt{3}} \sigma_z k_z \right). \quad (\text{B.19})$$

É fácil perceber que esta equação é conduzida imediatamente para a expressão

$$\mathbb{M}_3 \mathbb{M}_3^\dagger = \frac{\bar{P}_1^2}{3} (\sigma \cdot \mathbf{k}_\parallel) (\sigma \cdot \mathbf{k}_\parallel) + \frac{P_2^2}{3} \sigma_z \sigma_z k_z^2 + \frac{1}{3} \bar{P}_1 P_2 (\sigma \sigma_z + \sigma_z \sigma) \cdot \mathbf{k}_\parallel k_z. \quad (\text{B.20})$$

Substituindo (B.12) na equação (B.20) e manipulando algebricamente a expressão obtida, temos o seguinte resultado

$$\mathbb{M}_3 \mathbb{M}_3^\dagger = \frac{1}{3} \left(\bar{P}_1^2 k_\parallel^2 + P_2^2 k_z^2 \right) \mathbb{1}_{2 \times 2}. \quad (\text{B.21})$$

Existe um tipo de vínculo muito importante entre os três produtos matriciais determinados anteriormente. Esta relação será utilizada nas passagens que nos conduzirão ao cálculo do hamiltoniano efetivo que descreve o espinor da subbanda de condução ψ_0 . Somando as equações (B.15) e (B.18), temos

$$\mathbb{M}_1 \mathbb{M}_1^\dagger + \mathbb{M}_2 \mathbb{M}_2^\dagger = 2\mathbb{M}_3 \mathbb{M}_3^\dagger. \quad (\text{B.22})$$

B.3 A decomposição singular da matriz H_v

Mostramos no decorrer do capítulo 2 que reescrevendo o hamiltoniano de Kane em termos de blocos matriciais podemos aplicar facilmente o método algébrico conhecido como *folding down*. Entretanto, como cada bloco está associado a uma matriz cujos elementos em geral são operadores, buscamos uma forma de representação que torne bem simples sua ação nos autoestados que caracterizam a banda de condução ou mesmo sobre outros operadores. Ao contrário do que verificamos no apêndice anterior acerca do bloco H_{cv} , a primeira vista o bloco H_v será aquele que trará algumas dificuldades sobretudo pela dimensão da matriz que o representa, ou seja,

$$H_v = \begin{bmatrix} E_1 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_- & 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_- & 0 \\ -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_+ & E_1 & i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_- & 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_- \\ 0 & -i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_+ & E_2 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_- & -i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_+ & 0 \\ 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_+ & E_2 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ \\ i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_- & 0 & E_3 & i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_- \\ 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_+ & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_- & -i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_+ & E_3 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.23})$$

Nosso primeiro passo em busca de uma forma mais simples de representar H_v será desacoplar os termos diagonais daqueles não-diagonais. O leitor perceberá que esta medida trará consequências interessantes, em particular quando tratarmos apenas o caso da aproximação cúbica onde $\vartheta = 0$, ou seja, $\tilde{P}_1 = 0$. Neste contexto, o bloco H_v possui contribuição não-nula vinda apenas dos termos diagonais. Desta maneira,

$$H_v = H_{vD} + H_{vT}, \quad (\text{B.24})$$

onde H_{vD} está associado a parte diagonal do bloco H_v ,

$$H_{vD} = \begin{bmatrix} E_1 \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & E_2 \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.25})$$

e H_{vT} representa uma matriz hermitiana formada pelos elementos não-diagonais deste bloco

$$H_{vT} = \begin{bmatrix} 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_- & 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_- & 0 \\ -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_+ & 0 & i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_- & 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_- \\ 0 & -i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_+ & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_- & -i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_+ & 0 \\ 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}k_+ & 0 & 0 & -i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ \\ i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_+ & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_- & 0 & 0 & i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_- \\ 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{3\sqrt{2}}k_+ & 0 & i\frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{6}}k_- & -i\frac{2\tilde{P}_1}{3}k_+ & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.26})$$

O hamiltoniano H_{vT} pode ser simplificado se o particionarmos em nove blocos de dimensão 2×2 ,

$$H_{vT} = \begin{bmatrix} H_{vT11} & H_{vT12} & H_{vT13} \\ H_{vT12}^\dagger & H_{vT22} & H_{vT23} \\ H_{vT13}^\dagger & H_{vT23}^\dagger & H_{vT33} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.27})$$

A idéia consiste em tentar conectar cada bloco 2×2 aos vetores de componentes matriciais $\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$ e $\mathbf{N} = (N_x, N_y, N_z)$ ou mesmo ainda às matrizes de Pauli. Lembrando a representação matricial do operador de Rashba (22)

$$\begin{bmatrix} 0 & ik_- \\ -ik_+ & 0 \end{bmatrix} = k_y\sigma_x - k_x\sigma_y, \quad (\text{B.28})$$

após algumas manipulações algébricas os elementos diagonais de H_{vT} em (B.27) são dados por

$$H_{vT11} = H_{vT22} = \frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}}(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y), \quad H_{vT33} = \frac{2\tilde{P}_1}{3}(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y). \quad (\text{B.29})$$

Por argumentos semelhantes pode ser facilmente mostrado que os elementos não-diagonais da matriz em (B.27) assumem agora a seguinte representação

$$H_{vT12} = i\frac{2\tilde{P}_1}{3}N_zk_-, \quad H_{vT13} = i\frac{\sqrt{2}}{3}\tilde{P}_1M_xk_-, \quad H_{vT23} = -i\frac{\sqrt{2}}{3}\tilde{P}_1N_xk_+. \quad (\text{B.30})$$

Assim, a matriz H_{vT} de traço nulo que compõe H_v é escrita em termos de duas contribuições distintas, a saber,

$$H_{vT} = \frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{3}} \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix} (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \frac{\sqrt{2}}{3} \tilde{P}_1 \begin{bmatrix} 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & i\sqrt{2} N_z k_- & iM_x k_- \\ i\sqrt{2} M_z k_+ & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & -iN_x k_- \\ -iM_x k_+ & iN_x k_- & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.31})$$

Finalmente, o bloco matricial H_v que representa acoplamentos intrabanda de valência no modelo de Kane 8×8 pode ser reescrito de uma forma mais singela,

$$H_v = \begin{bmatrix} E_1 \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & E_2 \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix} + \frac{\tilde{P}_1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{3}} \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix} (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \frac{\sqrt{2}}{3} \tilde{P}_1 \begin{bmatrix} 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & i\sqrt{2} N_z k_- & iM_x k_- \\ i\sqrt{2} M_z k_+ & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} & -iN_x k_- \\ -iM_x k_+ & iN_x k_- & 0 \cdot \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.32})$$

Note que na parametrização cúbica onde $\vartheta = 0$, ou seja, $\tilde{P}_1 = 0$ e $\bar{P}_1 = P_1$, a matriz H_v assume um caráter puramente diagonal,

$$H_v = \begin{bmatrix} E_1 \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 & 0 \\ 0 & E_2 \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \mathbf{1}_{2 \times 2} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.33})$$

B.4 A ação das matrizes $\mathbb{M}_i$ e $\mathbb{M}_j$ no bloco H_v

Nesta seção vamos indicar os resultados provenientes da ação das matrizes $\mathbb{M}_l$ dadas na equação (B.12) nas componentes do bloco matricial H_{vT} que forma H_v . Vale ressaltar que os resultados fornecidos aqui são muito importantes durante o desenvolvimento do *folding down* no capítulo 3. Como são bem simples, não entraremos em muitos detalhes

acerca dos cálculos. Começando pelos termos associados ao primeiro bloco da matriz H_{vT} dada em (B.31),

$$\mathbb{M}_1 (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \mathbb{M}_1^\dagger = \frac{\sqrt{3}}{6} \bar{P}_1^2 (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) k_{||}^2 , \quad (\text{B.34})$$

$$\mathbb{M}_2 (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \mathbb{M}_2^\dagger = \frac{\sqrt{3}}{6} \bar{P}_1^2 (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) k_{||}^2 , \quad (\text{B.35})$$

$$\mathbb{M}_3 (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \mathbb{M}_3^\dagger = -\frac{1}{3} \left(\bar{P}_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2 \right) (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) . \quad (\text{B.36})$$

Sabendo que $M_z^\dagger = N_z$, $M_x^\dagger = M_x$ e $N_x^\dagger = N_x$, então seguem os resultados para os elementos do segundo bloco de H_{vT} ,

$$\mathbb{M}_1 N_z \mathbb{M}_2^\dagger = \frac{2}{3} \left\{ -\frac{\bar{P}_1^2}{4} N_z k_+^2 + P_2^2 M_z k_z^2 + \frac{\bar{P}_1 P_2}{2} \sigma_z k_+ k_z \right\} , \quad (\text{B.37})$$

$$\mathbb{M}_1 M_x \mathbb{M}_3^\dagger = -\frac{\sqrt{2}}{3} \left\{ \frac{1}{4} \left(3\bar{P}_1^2 k_{||}^2 + 2P_2^2 k_z^2 \right) M_z + \frac{\bar{P}_1^2}{4} N_z k_+^2 + \frac{\bar{P}_1 P_2}{2} \sigma_z k_+ k_z \right\} , \quad (\text{B.38})$$

$$\mathbb{M}_2 N_x \mathbb{M}_3^\dagger = -\frac{\sqrt{2}}{3} \left\{ \frac{1}{4} \left(3\bar{P}_1^2 k_{||}^2 + 2P_2^2 k_z^2 \right) N_z + \frac{\bar{P}_1^2}{4} M_z k_-^2 + \frac{\bar{P}_1 P_2}{2} \sigma_z k_- k_z \right\} . \quad (\text{B.39})$$

De posse destas expressões, agora é bem simples concluir as novas relações

$$\mathbb{M}_1 N_z \mathbb{M}_2^\dagger k_- - \mathbb{M}_2 M_z \mathbb{M}_1^\dagger k_+ = -\frac{i}{6} \left(\bar{P}_1^2 k_{||}^2 + 4P_2^2 k_z^2 \right) (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) , \quad (\text{B.40})$$

$$\mathbb{M}_1 M_x \mathbb{M}_3^\dagger k_- - \mathbb{M}_3 M_x \mathbb{M}_1^\dagger k_+ = \frac{i\sqrt{2}}{6} \left(\bar{P}_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2 \right) (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) , \quad (\text{B.41})$$

$$\mathbb{M}_3 N_x \mathbb{M}_2^\dagger k_- - \mathbb{M}_2 N_x \mathbb{M}_3^\dagger k_+ = \frac{i\sqrt{2}}{6} \left(\bar{P}_1^2 k_{||}^2 + P_2^2 k_z^2 \right) (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) . \quad (\text{B.42})$$

Apêndice C

Transformações de similaridade

C.1 Para uma matriz de ordem dois

Nesta breve seção vamos determinar explicitamente o resultado da ação da transformação de similaridade, a qual diagonaliza o operador helicidade, aplicada a uma dada matriz arbitrária Q de dimensão 2×2 ,

$$Q = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}. \quad (\text{C.1})$$

Apenas para relembrar ao leitor, a transformação de similaridade que diagonaliza o operador helicidade no plano $\Sigma = \mathbf{k}_{||} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ é caracterizada pela matriz unitária Λ dada na equação (4.2),

$$\Lambda = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} +e^{-i\vartheta} & -e^{-i\vartheta} \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad e^{\pm i\vartheta} = \frac{k_{\pm}}{k_{||}}. \quad (\text{C.2})$$

Atuando a transformação de similaridade na matriz Q , temos

$$\begin{aligned} \Lambda^{-1}Q\Lambda = \frac{1}{2} \Big[(a_{22} + a_{11}) \mathbf{1}_{2 \times 2} + (a_{22} - a_{11}) \sigma_x + (a_{12}e^{i\vartheta} + a_{21}e^{-i\vartheta}) \sigma_z + \\ + (a_{12}e^{i\vartheta} - a_{21}e^{-i\vartheta}) i\sigma_y \Big]. \quad (\text{C.3}) \end{aligned}$$

Sabendo que $e^{\pm i\vartheta} = k_{\pm}/k_{\parallel}$, podemos simplificar o resultado indicado na equação (C.3), a saber,

$$\begin{aligned} \Lambda^{-1}Q\Lambda = \frac{1}{2k_{\parallel}} \{ & k_{\parallel}(a_{22} + a_{11}) \mathbb{1}_{2 \times 2} + k_{\parallel}(a_{22} - a_{11})\sigma_x + [(a_{12} + a_{21})k_x + i(a_{12} - a_{21})k_y]\sigma_z + \\ & - [(a_{12} + a_{21})k_y - i(a_{12} - a_{21})k_x]\sigma_y \} . \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Apenas para exemplificar este resultado, a ação da transformação de similaridade para o caso em que a matriz Q é igual a cada uma das matrizes de Pauli σ_x , σ_y e σ_z é dada pelo conjunto de equações

$$\Lambda^{-1}\sigma_x\Lambda = -\sigma_z , \quad \Lambda^{-1}\sigma_y\Lambda = \frac{1}{k_{\parallel}}(k_x\sigma_y + k_y\sigma_z) , \quad \Lambda^{-1}\sigma_z\Lambda = -\sigma_x . \quad (\text{C.5})$$

C.2 Para o operador helicidade e o potencial vetor

Conforme mostramos no capítulo 6, ao introduzir o potencial vetor $\mathbf{A}$ na matriz de Kane 8×8 o hamiltoniano efetivo em primeira ordem de aproximação no inverso do gap de energia é modificado para a forma apresentada na equação (6.38). Dentre as contribuições neste hamiltoniano, as duas últimas apresentam uma componente matricial muito semelhante ao operador helicidade, embora dependente das coordenadas de $\mathbf{A}$,

$$\mathbf{A}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} = A_x k_x + A_y k_y = \begin{bmatrix} 0 & A_- \\ A_+ & 0 \end{bmatrix} , \quad (\text{C.6})$$

onde $A_{\pm} = A_x \pm iA_y$. Dada a equação (C.4), estamos interessados em determinar como este termo se comporta mediante a transformação de similaridade que diagonaliza o operador helicidade. Comparado com a matriz Q utilizada na discussão da seção C.1, este termo é bem mais simples pois todas as entradas na diagonal principal são identicamente nulas, ou seja, $a_{11} = a_{22} = 0$. Esta propriedade simplifica consideravelmente os cálculos,

a saber,

$$\begin{aligned} \Lambda^{-1} (\mathbf{A}_{\parallel} \cdot \sigma) \Lambda = & \frac{1}{2k_{\parallel}} [(A_{-} + A_{+}) k_x + i (A_{-} - A_{+}) k_y] \sigma_z + \\ & - \frac{1}{2k_{\parallel}} [(A_{-} - A_{+}) k_y - i (A_{-} - A_{+}) k_x] \sigma_y . \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Os elementos A_{+} e A_{-} presentes na equação (C.7) satisfazem as identidades

$$A_{-} + A_{+} = 2A_x , \quad A_{-} - A_{+} = -2iA_y . \quad (\text{C.8})$$

A partir deste resultado, a ação da matriz unitária Λ no produto escalar $\mathbf{A}_{\parallel} \cdot \sigma$ fornece o resultado

$$\Lambda^{-1} (\mathbf{A}_{\parallel} \cdot \sigma) \Lambda = \frac{(A_x k_x + A_y k_y)}{k_{\parallel}} \sigma_z - \frac{(A_x k_y - A_y k_x)}{k_{\parallel}} \sigma_y . \quad (\text{C.9})$$

Muito embora esta equação já seja de grande valia para os cálculos desenvolvidos no capítulo 6, existe uma forma mais simples de apresentá-lo que tem como elemento central o potencial vetor $\mathbf{A}$, ou seja, independente de modo direto das componentes A_x , A_y e A_z . Isto será muito útil no cálculo dos elementos de matriz na base de fótons do espaço de Fock. A idéia consiste apenas em reescrever a equação (C.9) em função de novos produtos escalares e vetoriais com o vetor de onda no plano $\mathbf{k}_{\parallel}$. Como os cálculos são bem simples, segue que

$$\Lambda^{-1} (\mathbf{A}_{\parallel} \cdot \sigma) \Lambda = \frac{1}{k_{\parallel}} [(\mathbf{A}_{\parallel} \cdot \mathbf{k}_{\parallel}) \sigma_z + \hat{z} \cdot (\mathbf{k}_{\parallel} \times \mathbf{A}) \sigma_y] . \quad (\text{C.10})$$

Apêndice D

Poço simétrico com duas subbandas

D.1 A simplificação nos vetores de estado

Nesta seção mostraremos que é possível escrever os autoestados do hamiltoniano $\widetilde{H}$ na base de duas subbandas do poço quântico simétrico de uma maneira mais conveniente. A idéia central é deixar os cálculos que envolvem as transições ópticas no capítulo 6 ligeiramente mais intuitivas e radicalmente concisas. Relembrando a forma dos autoestados de $\widetilde{H}$, temos

$$|k_{\parallel}, \lambda_1, \lambda_2\rangle = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{\lambda_2 \Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}} \left\{ \frac{i \lambda_1 \lambda_2 |\eta_{01}| k_{\parallel}}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01}) + \lambda_2 \Omega_{\lambda_1}(0)} |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \lambda_1 |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \right. \\ \left. - \frac{i \lambda_2 |\eta_{01}| k_{\parallel}}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01}) + \lambda_2 \Omega_{\lambda_1}(0)} |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \right\} . \quad (\text{D.1})$$

A chave para nossa simplificação está no acoplamento intersubbanda dependente em spin $|\eta_{01}|$. Se voltarmos a equação (4.66) onde definimos a função $\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})$, é bem fácil verificar a igualdade

$$|\eta_{01}| k_{\parallel} = \sqrt{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01}) + \Omega_{\lambda_1}(0)} \sqrt{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01}) - \Omega_{\lambda_1}(0)} . \quad (\text{D.2})$$

O próximo passo consiste em analisar os produtos que aparecem na equação (D.1) envolvendo o termo de normalização do autoestado e os coeficientes de cada produto tensorial. Tomando os devidos cuidados com os sinais $\pm$, após algumas manipulações algébricas

segue a identidade

$$\frac{|\eta_{01}|k_{||}}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01}) \pm \Omega_{\lambda_1}(0)} \sqrt{1 \pm \frac{\Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}} = \sqrt{1 \mp \frac{\Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}} . \quad (\text{D.3})$$

Substituindo este resultado em (D.1) e indicando o valor do número quântico λ_2 , somos capazes de reescrever esta equação de tal maneira que a dependência explícita em $|\eta_{01}|$ desapareça completamente, a saber,

$$|k_{||}, \lambda_1, \pm\rangle = \frac{1}{2} \left\{ \pm i \lambda_1 \sqrt{1 \mp \frac{\Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}} |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \lambda_1 \sqrt{1 \pm \frac{\Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}} |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \mp i \sqrt{1 \mp \frac{\Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}} |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + \sqrt{1 \pm \frac{\Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}} |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \right\} , \quad (\text{D.4})$$

Agora, a expressão resultante é função de apenas dois coeficientes cujo aspecto algébrico é bem semelhante. Então, podemos naturalmente definir

$$a_{\lambda_1\lambda_2} = \sqrt{1 - \lambda_2 \frac{\Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}} , \quad b_{\lambda_1\lambda_2} = \sqrt{1 + \lambda_2 \frac{\Omega_{\lambda_1}(0)}{\Omega_{\lambda_1}(\eta_{01})}} . \quad (\text{D.5})$$

Contudo, dada uma escolha particular do número quântico λ_2 estes coeficientes não são totalmente independentes e obedecem os vínculos

$$b_{\lambda_1+} = a_{\lambda_1-} , \quad b_{\lambda_1-} = a_{\lambda_1+} . \quad (\text{D.6})$$

Estendendo este perfil arbitrário ao vetor de estado em (D.4), finalmente temos em mãos uma expressão compacta e fechada para o espinor geral associado a cada um dos quatro autoestados do hamiltoniano $\widetilde{H}$, a saber,

$$|k_{||}, \lambda_1, \lambda_2\rangle = \frac{1}{2} \{ i \lambda_2 a_{\lambda_1\lambda_2} |u_0\rangle \otimes (\lambda_1 |\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) + b_{\lambda_1\lambda_2} |u_1\rangle \otimes (\lambda_1 |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \} . \quad (\text{D.7})$$

D.2 O termo perturbativo

Agora que encontramos uma alternativa suficientemente simples para escrever os autoestados da representação matricial de $\widetilde{H}$ na base de estados com duas subbandas do poço quântico simétrico, nesta seção determinaremos a projeção de certos operadores nestas autofunções. O intuito aqui é deixar mais simples o cálculo do elemento de matriz da perturbação $W(t)$ nas transições ópticas que envolvem a transição de um elétron de condução entre os estados $|k_{||}, \lambda_3, \lambda_4\rangle$ e $|k_{||}, \lambda_1, \lambda_2\rangle$ via a absorção de um fóton. Como pode ser facilmente observado através da equação (6.41), além da identidade, o hamiltoniano $W(t)$ depende também das matrizes de Pauli, em geral acompanhadas do operador k_z que é, de fato, a maior de nossas preocupações uma vez que o vetor de onda no plano $\mathbf{k}_{||}$ não atua nos estados $|u_0\rangle$. Começando pelos elementos de matriz mais simples, temos

$$\begin{aligned} \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | \mathbb{1}_{2 \times 2} | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle &= \frac{1}{4} (\lambda_1 \lambda_3 \langle \uparrow | \mathbb{1}_{2 \times 2} | \uparrow \rangle + \langle \downarrow | \mathbb{1}_{2 \times 2} | \downarrow \rangle) (\lambda_2 \lambda_4 a_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4} + \\ &\quad + b_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4}) \quad , \quad (\text{D.8}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | \sigma_x | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle &= \frac{1}{4} (\lambda_1 \langle \uparrow | \sigma_x | \downarrow \rangle + \lambda_3 \langle \downarrow | \sigma_x | \uparrow \rangle) (b_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} - \lambda_2 \lambda_4 a_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) \quad , \\ &\quad (\text{D.9}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | \sigma_z | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle &= \frac{1}{4} (\lambda_1 \lambda_3 \langle \uparrow | \sigma_z | \uparrow \rangle + \langle \downarrow | \sigma_z | \downarrow \rangle) (b_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} + \lambda_2 \lambda_4 a_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) \quad . \\ &\quad (\text{D.10}) \end{aligned}$$

Há dois pontos importantes a esclarecer acerca destes resultados. O primeiro deles envolve a ortonormalidade das autofunções do poço quântico simétrico, ou seja, $\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{n,m}$. Ademais, o leitor pode questionar ainda o motivo que nos levou a não considerar o elemento de matriz de σ_y . O ponto é que este operador está sempre acompanhado de k_z , tornando seu cálculo mais elaborado e fruto da discussão que segue. Como a projeção da

identidade e das matrizes σ_x e σ_z nos estados de spin $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ é bem simples, temos

$$\langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | \mathbb{1}_{2 \times 2} | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = \frac{1}{4} (\lambda_1 \lambda_3 + 1) (b_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} + \lambda_2 \lambda_4 a_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) , \quad (\text{D.11})$$

$$\langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | \sigma_x | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = \frac{1}{4} (\lambda_1 + \lambda_3) (b_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} - \lambda_2 \lambda_4 a_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) , \quad (\text{D.12})$$

$$\langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | \sigma_z | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = \frac{1}{4} (\lambda_1 \lambda_3 - 1) (b_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} + \lambda_2 \lambda_4 a_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) . \quad (\text{D.13})$$

Note que se escolhermos $\lambda_3 = -\lambda_1$ os elementos de matriz da identidade $\mathbb{1}_{2 \times 2}$ e σ_x se anulam. Em contrapartida, dado $\lambda_j^2 = 1$, onde $j = (1, 2, 3, 4)$, o mesmo ocorre com o elemento de matriz de σ_z tomando o caso em que $\lambda_1 = \lambda_3$. Para completar o raciocínio, resta determinar todos os elementos de matriz que de alguma forma dependem do operador k_z . Enumerando as possibilidades tendo em vista a forma da perturbação $W(t)$, temos

$$\begin{aligned} \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | k_z \mathbb{1}_{2 \times 2} | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = & -\frac{i}{4} (\lambda_1 \lambda_3 \langle \uparrow | \mathbb{1}_{2 \times 2} | \uparrow \rangle - \langle \downarrow | \mathbb{1}_{2 \times 2} | \downarrow \rangle) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} \langle u_0 | k_z | u_1 \rangle + \\ & - \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4} \langle u_0 | k_z | u_1 \rangle^*) , \quad (\text{D.14}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | k_z \sigma_x | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = & -\frac{i}{4} (\lambda_1 \langle \uparrow | \sigma_x | \downarrow \rangle - \lambda_3 \langle \downarrow | \sigma_x | \uparrow \rangle) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} \langle u_0 | k_z | u_1 \rangle + \\ & + \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4} \langle u_0 | k_z | u_1 \rangle^*) , \quad (\text{D.15}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | k_z \sigma_y | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = & -\frac{i}{4} (\lambda_1 \langle \uparrow | \sigma_y | \downarrow \rangle - \lambda_3 \langle \downarrow | \sigma_y | \uparrow \rangle) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} \langle u_0 | k_z | u_1 \rangle + \\ & - \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4} \langle u_0 | k_z | u_1 \rangle^*) , \quad (\text{D.16}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | k_z \sigma_z | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = & -\frac{i}{4} (\lambda_1 \lambda_3 \langle \uparrow | \sigma_z | \uparrow \rangle - \langle \downarrow | \sigma_z | \downarrow \rangle) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} \langle u_0 | k_z | u_1 \rangle + \\ & - \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4} \langle u_0 | k_z | u_1 \rangle^*) . \quad (\text{D.17}) \end{aligned}$$

É importante deixar claro que para encontrar estas expressões exploramos algumas propriedades do elemento de matriz $\langle u_m | k_z | u_n \rangle$ frente a paridade das autofunções do poço quântico simétrico. Em particular, tomando o caso $m = n$, mostramos no capítulo 4 que

$$\langle u_m | k_z | u_m \rangle = 0 . \quad (\text{D.18})$$

Além disso, uma vez que a componente k_z do vetor de onda comporta-se aqui como um operador, ou seja, $k_z = -i\partial/\partial z$, vale ainda a relação

$$\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle = -i |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| . \quad (\text{D.19})$$

Como $\langle u_1 | k_z | u_0 \rangle = \langle u_0 | k_z | u_1 \rangle^*$ devido a hermiticidade do operador diferencial k_z , podemos então escrever

$$\langle u_1 | k_z | u_0 \rangle = i |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| . \quad (\text{D.20})$$

Agregando estes resultados a projeção das matrizes de Pauli na base de estados de spin $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$, somos capazes de reescrever os elementos de matriz dados em (D.14)-(D.17) da seguinte maneira

$$\langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | k_z \mathbb{1}_{2 \times 2} | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = +\frac{1}{4} |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| (1 - \lambda_1 \lambda_3) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} + \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) , \quad (\text{D.21})$$

$$\langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | k_z \sigma_x | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = -\frac{1}{4} |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| (\lambda_1 - \lambda_3) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} - \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) , \quad (\text{D.22})$$

$$\langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | k_z \sigma_y | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = +\frac{i}{4} |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| (\lambda_1 + \lambda_3) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} - \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) , \quad (\text{D.23})$$

$$\langle k_{||}, \lambda_1, \lambda_2 | k_z \sigma_z | k_{||}, \lambda_3, \lambda_4 \rangle = -\frac{1}{4} |\langle u_0 | k_z | u_1 \rangle| (1 + \lambda_1 \lambda_3) (\lambda_2 a_{\lambda_1, \lambda_2} b_{\lambda_3, \lambda_4} + \lambda_4 b_{\lambda_1, \lambda_2} a_{\lambda_3, \lambda_4}) . \quad (\text{D.24})$$

Este conjunto de equações será muito útil no tratamento das transições ópticas para o caso de duas subbandas no capítulo 6, aplicando-se perfeitamente em escolhas arbitrárias tanto dos números quânticos de spin (λ_1, λ_3) quanto dos números quânticos de pseudo-spin (λ_2, λ_4) .

D.3 A álgebra dos coeficientes $\mathcal{Q}$, $\mathcal{S}$ e $\mathcal{T}$

Nesta seção calcularemos rapidamente a soma de quadrados que surge na equação (6.109) para a taxa de transição do modelo de duas subbandas quando consideramos diferentes paridades dos autoestados do poço quântico simétrico e a presença de *spin flip*.

Eis a expressão que queremos simplificar

$$J(k_{||}, \eta_{01}) = \left(\mathcal{C}_4 \mathcal{S}_{-, \mu'}^{+, \mu} + \mathcal{C}_5 k_{||} \mathcal{Q}_{-, \mu'}^{+, \mu} + \mathcal{C}_6 \mathcal{T}_{-, \mu'}^{+, \mu} \right)^2, \quad (\text{D.25})$$

onde os parâmetros $\mathcal{Q}_{-, \mu'}^{+, \mu}$, $\mathcal{S}_{-, \mu'}^{+, \mu}$ e $\mathcal{T}_{-, \mu'}^{+, \mu}$ são dados pelas equações

$$\mathcal{Q}_{-, \mu'}^{+, \mu} = \sqrt{1 + \mu \frac{\Omega_+(0)}{\Omega_+(\eta_{01})}} \sqrt{1 + \mu' \frac{\Omega_-(0)}{\Omega_-(\eta_{01})}} + \mu \mu' \sqrt{1 - \mu \frac{\Omega_+(0)}{\Omega_+(\eta_{01})}} \sqrt{1 - \mu' \frac{\Omega_-(0)}{\Omega_-(\eta_{01})}}, \quad (\text{D.26})$$

$$\mathcal{S}_{-, \mu'}^{+, \mu} = \mu \sqrt{1 - \mu \frac{\Omega_+(0)}{\Omega_+(\eta_{01})}} \sqrt{1 + \mu' \frac{\Omega_-(0)}{\Omega_-(\eta_{01})}} + \mu' \sqrt{1 + \mu \frac{\Omega_+(0)}{\Omega_+(\eta_{01})}} \sqrt{1 - \mu' \frac{\Omega_-(0)}{\Omega_-(\eta_{01})}}, \quad (\text{D.27})$$

$$\mathcal{T}_{-, \mu'}^{+, \mu} = \mu \sqrt{1 - \mu \frac{\Omega_+(0)}{\Omega_+(\eta_{01})}} \sqrt{1 + \mu' \frac{\Omega_-(0)}{\Omega_-(\eta_{01})}} - \mu' \sqrt{1 + \mu \frac{\Omega_+(0)}{\Omega_+(\eta_{01})}} \sqrt{1 - \mu' \frac{\Omega_-(0)}{\Omega_-(\eta_{01})}}. \quad (\text{D.28})$$

O primeiro passo para simplificar a função $J(k_{||}, \eta_{01})$ consiste na expansão da soma de quadrados indicada,

$$\begin{aligned} J(k_{||}, \eta_{01}) &= \mathcal{C}_4^2 \left(\mathcal{S}_{-, \mu'}^{+, \mu} \right)^2 + \mathcal{C}_5^2 k_{||}^2 \left(\mathcal{Q}_{-, \mu'}^{+, \mu} \right)^2 + \mathcal{C}_6^2 \left(\mathcal{T}_{-, \mu'}^{+, \mu} \right)^2 + \\ &+ 2 \left(\mathcal{C}_4 \mathcal{C}_5 k_{||} \mathcal{Q}_{-, \mu'}^{+, \mu} \mathcal{S}_{-, \mu'}^{+, \mu} + \mathcal{C}_5 \mathcal{C}_6 k_{||} \mathcal{Q}_{-, \mu'}^{+, \mu} \mathcal{T}_{-, \mu'}^{+, \mu} + \mathcal{C}_4 \mathcal{C}_6 \mathcal{S}_{-, \mu'}^{+, \mu} \mathcal{T}_{-, \mu'}^{+, \mu} \right). \end{aligned} \quad (\text{D.29})$$

Conhecendo a forma de cada termo presente na equação anterior, vamos calcular inicialmente cada uma das potências quadráticas da função $J(k_{||}, \eta_{01})$,

$$\left(\mathcal{Q}_{-, \mu'}^{+, \mu} \right)^2 = 2 - 2\mu\mu' \frac{\Omega_+(0)\Omega_-(0)}{\Omega_+(\eta_{01})\Omega_-(\eta_{01})} - 2\mu\mu' \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_+(0)}{\Omega_+(\eta_{01})} \right]^2} \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_-(0)}{\Omega_-(\eta_{01})} \right]^2}, \quad (\text{D.30})$$

$$\left(\mathcal{S}_{-, \mu'}^{+, \mu} \right)^2 = 2 - 2\mu\mu' \frac{\Omega_+(0)\Omega_-(0)}{\Omega_+(\eta_{01})\Omega_-(\eta_{01})} + 2\mu\mu' \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_+(0)}{\Omega_+(\eta_{01})} \right]^2} \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_-(0)}{\Omega_-(\eta_{01})} \right]^2}, \quad (\text{D.31})$$

$$\left(\mathcal{T}_{-, \mu'}^{+, \mu} \right)^2 = 2 + 2\mu\mu' \frac{\Omega_+(0)\Omega_-(0)}{\Omega_+(\eta_{01})\Omega_-(\eta_{01})} + 2\mu\mu' \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_+(0)}{\Omega_+(\eta_{01})} \right]^2} \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_-(0)}{\Omega_-(\eta_{01})} \right]^2}. \quad (\text{D.32})$$

Resta agora a simplificação dos produtos mistos indicados, cujo procedimento é estritamente similar aos cálculos anteriores,

$$\mathcal{Q}_{-,\mu'}^{+,\mu} \mathcal{T}_{-,\mu'}^{+,\mu} = 2\mu\mu' \frac{\Omega_{-}(0)}{\Omega_{-}(\eta_{01})} \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{+}(0)}{\Omega_{+}(\eta_{01})} \right]^2} + 2\mu\mu' \frac{\Omega_{+}(0)}{\Omega_{+}(\eta_{01})} \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{-}(0)}{\Omega_{-}(\eta_{01})} \right]^2}, \quad (\text{D.33})$$

$$\mathcal{Q}_{-,\mu'}^{+,\mu} \mathcal{S}_{-,\mu'}^{+,\mu} = 2\mu \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{+}(0)}{\Omega_{+}(\eta_{01})} \right]^2} + 2\mu' \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{-}(0)}{\Omega_{-}(\eta_{01})} \right]^2}, \quad (\text{D.34})$$

$$\mathcal{S}_{-,\mu'}^{+,\mu} \mathcal{T}_{-,\mu'}^{+,\mu} = 2\mu' \frac{\Omega_{-}(0)}{\Omega_{-}(\eta_{01})} - 2\mu \frac{\Omega_{+}(0)}{\Omega_{+}(\eta_{01})}. \quad (\text{D.35})$$

Substituindo (D.30)–(D.35) na equação (D.29), encontramos a expressão

$$\begin{aligned} J(k_{\parallel}, \eta_{01}) = & 2 \left(\mathcal{C}_4^2 + \mathcal{C}_5^2 k_{\parallel}^2 + \mathcal{C}_6^2 \right) - 2\mu\mu' \frac{\Omega_{+}(0)\Omega_{-}(0)}{\Omega_{+}(\eta_{01})\Omega_{-}(\eta_{01})} \left(\mathcal{C}_4^2 + \mathcal{C}_5^2 k_{\parallel}^2 - \mathcal{C}_6^2 \right) + \\ & - 2\mu\mu' \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{+}(0)}{\Omega_{+}(\eta_{01})} \right]^2} \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{-}(0)}{\Omega_{-}(\eta_{01})} \right]^2} \left(\mathcal{C}_4^2 - \mathcal{C}_5^2 k_{\parallel}^2 - \mathcal{C}_6^2 \right) + \\ & + 4\mathcal{C}_4\mathcal{C}_5 k_{\parallel} \left(\mu \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{+}(0)}{\Omega_{+}(\eta_{01})} \right]^2} + \mu' \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{-}(0)}{\Omega_{-}(\eta_{01})} \right]^2} \right) + 2\mathcal{C}_4\mathcal{C}_6 \left(\mu' \frac{\Omega_{-}(0)}{\Omega_{-}(\eta_{01})} - \mu \frac{\Omega_{+}(0)}{\Omega_{+}(\eta_{01})} \right) + \\ & + 4\mathcal{C}_5\mathcal{C}_6 k_{\parallel} \mu \mu' \left(\frac{\Omega_{-}(0)}{\Omega_{-}(\eta_{01})} \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{+}(0)}{\Omega_{+}(\eta_{01})} \right]^2} + \frac{\Omega_{+}(0)}{\Omega_{+}(\eta_{01})} \sqrt{1 - \left[\frac{\Omega_{-}(0)}{\Omega_{-}(\eta_{01})} \right]^2} \right). \quad (\text{D.36}) \end{aligned}$$

Voltando à equação onde definimos a função $\Omega_{\mu}(\eta_{01})$, temos

$$\Omega_{\mu}(\eta_{01}) = \sqrt{|\eta_{01}|^2 k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2M_{\parallel}} + \beta_{+} - \mu\epsilon_{-} \right)^2}. \quad (\text{D.37})$$

Tendo este resultado em mente, podemos submeter a equação (D.36) a algumas manipulações algébricas no intuito de escrevê-la numa forma mais econômica. Assim, tomando os devidos cuidados, obtemos finalmente

$$\begin{aligned} J(k_{\parallel}, \eta_{01}) = & 2 \left(\mathcal{C}_4^2 + \mathcal{C}_5^2 k_{\parallel}^2 + \mathcal{C}_6^2 \right) + \\ & - \frac{2\mu\mu'}{\Omega_{+}(\eta_{01})\Omega_{-}(\eta_{01})} \left\{ \left(\mathcal{C}_4^2 + \mathcal{C}_5^2 k_{\parallel}^2 - \mathcal{C}_6^2 \right) \left[\left(\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2M_{\parallel}} + \beta_{+} \right)^2 - \epsilon_{-}^2 \right] + |\eta_{01}|^2 k_{\parallel}^2 \left(\mathcal{C}_4^2 - \mathcal{C}_5^2 k_{\parallel}^2 - \mathcal{C}_6^2 \right) + \right. \\ & \left. - 2\mathcal{C}_5\mathcal{C}_6 |\eta_{01}| k_{\parallel}^2 \left(\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2M_{\parallel}} + \beta_{+} \right) \right\} + \frac{4\mathcal{C}_4\mathcal{C}_6}{\Omega_{+}(\eta_{01})\Omega_{-}(\eta_{01})} \left(\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2M_{\parallel}} + \beta_{+} \right) [\mu' \Omega_{+}(\eta_{01}) - \mu \Omega_{-}(\eta_{01})] + \\ & + \frac{4\mathcal{C}_4}{\Omega_{+}(\eta_{01})\Omega_{-}(\eta_{01})} \left(\mathcal{C}_6 \epsilon_{-} + \mathcal{C}_5 |\eta_{01}| k_{\parallel}^2 \right) [\mu' \Omega_{+}(\eta_{01}) + \mu \Omega_{-}(\eta_{01})]. \quad (\text{D.38}) \end{aligned}$$

Apêndice E

Produtos matriciais com o acoplamento mínimo

Como discutimos exaustivamente no decorrer do capítulo 3, o hamiltoniano de Kane foi convenientemente escrito em termos de blocos matriciais no intuito de facilitar o uso do *folding down*. Particularmente no que se refere a interação elétron-fóton, mostramos no capítulo 6 que as componentes do bloco H_c assumem a forma

$$\mathbb{M}_1 = \frac{2\bar{P}_1}{\sqrt{6}} \mathbf{M} \cdot \left(\mathbf{k}_\parallel + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_\parallel \right) + \frac{2P_2}{\sqrt{6}} M_z \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right) , \quad (\text{E.1})$$

$$\mathbb{M}_2 = \frac{2\bar{P}_1}{\sqrt{6}} \mathbf{N} \cdot \left(\mathbf{k}_\parallel + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_\parallel \right) + \frac{2P_2}{\sqrt{6}} N_z \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right) , \quad (\text{E.2})$$

$$\mathbb{M}_3 = -\frac{\bar{P}_1}{\sqrt{3}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{k}_\parallel + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_\parallel \right) - \frac{P_2}{\sqrt{3}} \sigma_z \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right) . \quad (\text{E.3})$$

Convém ressaltar que $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ representa um vetor cujas componentes são dadas em função das matrizes de Pauli. O mesmo acontece com o vetor $\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$, onde

$$M_x = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} , \quad M_y = -\frac{i}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} , \quad M_z = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} , \quad (\text{E.4})$$

e também com o vetor $\mathbf{N} = (N_x, N_y, N_z)$ onde, analogamente,

$$N_x = +\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} , \quad N_y = -\frac{i}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} , \quad N_z = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} . \quad (\text{E.5})$$

Através do *folding down* somos capazes de determinar uma equação efetiva para o espinor ψ_0 ligado a banda de condução, mesmo considerando a interação radiação-matéria. Escolhendo num primeiro momento reter apenas a primeira ordem de aproximação no processo de linearização adotado na equação efetiva, uma das quantidades algébricas a ser calculada envolve o produto matricial $\mathbb{M}_l \mathbb{M}_l^\dagger$. Como $M_y = iM_x$ e $N_y = -iN_x$, calculando cada produto escalar indicado neste conjunto de equações temos

$$\mathbb{M}_1 = \frac{2}{\sqrt{6}} \left[(\bar{P}_1 M_x k_+ + P_2 M_z k_z) + \frac{e}{\hbar c} (\bar{P}_1 M_x A_+ + P_2 M_z A_z) \right], \quad (\text{E.6})$$

$$\mathbb{M}_2 = \frac{2}{\sqrt{6}} \left[(\bar{P}_1 N_x k_- + P_2 N_z k_z) + \frac{e}{\hbar c} (\bar{P}_1 N_x A_- + P_2 N_z A_z) \right], \quad (\text{E.7})$$

$$\mathbb{M}_3 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \left[(\bar{P}_1 \Sigma + P_2 \sigma_z k_z) + \frac{e}{\hbar c} (\bar{P}_1 \mathbf{A}_\parallel \cdot \boldsymbol{\sigma} + P_2 \sigma_z A_z) \right], \quad (\text{E.8})$$

onde Σ representa o operador helicidade no plano,

$$\Sigma = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{E.9})$$

Uma vez que $M_x^\dagger = M_x$, $N_x^\dagger = N_x$ e $M_z^\dagger = N_z$, podemos calcular o hermiteano complexo de cada matriz $\mathbb{M}_l$, a saber,

$$\mathbb{M}_1^\dagger = \frac{2}{\sqrt{6}} \left[(\bar{P}_1 M_x k_- + P_2 N_z k_z) + \frac{e}{\hbar c} (\bar{P}_1 M_x A_- + P_2 N_z A_z) \right], \quad (\text{E.10})$$

$$\mathbb{M}_2^\dagger = \frac{2}{\sqrt{6}} \left[(\bar{P}_1 N_x k_+ + P_2 M_z k_z) + \frac{e}{\hbar c} (\bar{P}_1 N_x A_+ + P_2 M_z A_z) \right], \quad (\text{E.11})$$

$$\mathbb{M}_3^\dagger = -\frac{1}{\sqrt{3}} \left[(\bar{P}_1 \Sigma + P_2 \sigma_z k_z) + \frac{e}{\hbar c} (\bar{P}_1 \mathbf{A}_\parallel \cdot \boldsymbol{\sigma} + P_2 \sigma_z A_z) \right]. \quad (\text{E.12})$$

De todas as três matrizes citadas, somente $\mathbb{M}_3$ é hermiteana. Isto pode ser explicado através de sua dependência no operador helicidade e das matrizes de Pauli, todas quantidades separadamente hermiteanas. Antes de passar para o que interessa, adiantaremos um resultado algébrico importante que estará presente na maioria dos produtos $\mathbb{M}_l \mathbb{M}_l^\dagger$. O leitor pode verificar facilmente a expressão

$$A_\mp k_\pm = (A_x \mp iA_y) (k_x \pm ik_y) = A_x k_x \pm iA_x k_y \mp iA_y k_x + A_y k_y. \quad (\text{E.13})$$

Através desta equação podemos computar a soma entre os elementos A_+k_- e A_-k_+ , dada simplesmente pela expressão

$$A_-k_+ + A_+k_- = 2(A_xk_x + iA_yk_y) = 2\mathbf{A}_{||} \cdot \mathbf{k}_{||} . \quad (\text{E.14})$$

Resta ainda listar algumas das propriedades frente aos produtos das componentes cartesianas dos vetores $\mathbf{M}$ e $\mathbf{N}$. Começando inicialmente pelos produtos $M_r M_r^\dagger$ e $N_r N_r^\dagger$, onde $r \in \{x, y, z\}$, temos

$$M_x M_x^\dagger = +\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_y M_y^\dagger = +\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_z M_z^\dagger = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{E.15})$$

$$N_x N_x^\dagger = +\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}, \quad N_y N_y^\dagger = +\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}, \quad N_z N_z^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{E.16})$$

Analogamente, para os produtos mistos da forma $M_r M_s^\dagger$ e $N_r N_s^\dagger$, onde $\{r, s\} \in \{x, y, z\}$, temos

$$M_x M_y^\dagger = -\frac{i}{4} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_x M_z^\dagger = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad M_y M_z^\dagger = -\frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{E.17})$$

$$N_x N_y^\dagger = +\frac{i}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}, \quad N_x N_z^\dagger = +\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad N_y N_z^\dagger = -\frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{E.18})$$

Agora que estamos munidos de todos os recursos algébricos suficientes, vamos calcular separadamente cada um dos termos $\mathbb{M}_l \mathbb{M}_l^\dagger$, a começar por $l = 1$,

$$\begin{aligned} \mathbb{M}_1 \mathbb{M}_1^\dagger = & \frac{2}{3} \left\{ \left[\overline{P}_1^2 M_x M_x k_{||}^2 + P_2^2 M_z N_z k_z^2 + \overline{P}_1 P_2 (M_x N_z k_+ + M_z M_x k_-) k_z \right] + \right. \\ & + \frac{e}{\hbar c} \left[\overline{P}_1^2 M_x M_x (A_- k_+ + A_+ k_-) + 2P_2^2 M_z N_z A_z k_z + \right. \\ & + \overline{P}_1 P_2 (M_x N_z A_+ + M_z M_x A_-) k_z + \overline{P}_1 P_2 (M_x N_z k_+ + M_z M_x k_-) A_z \left. \right] + \\ & \left. + \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 \left[\overline{P}_1^2 M_x M_x A_{||}^2 + P_2^2 M_z N_z A_z^2 + \overline{P}_1 P_2 (M_x N_z A_+ + M_z M_x A_-) A_z \right] \right\}. \quad (\text{E.19}) \end{aligned}$$

Substituindo as equações (E.9), (E.14), (E.15) e (E.17), este resultado aparentemente

complicado se reduz à expressão

$$\mathbb{M}_1 \mathbb{M}_1^\dagger = \frac{\bar{P}_1^2}{6} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \left(\mathbf{k}_\parallel + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_\parallel \right)^2 + \frac{2P_2^2}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right)^2 + \\ - \frac{\bar{P}_1 P_2}{3} \left(\Sigma + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_\parallel \cdot \sigma \right) \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right) . \quad (\text{E.20})$$

Para o caso $l = 2$, temos

$$\mathbb{M}_2 \mathbb{M}_2^\dagger = \frac{2}{3} \left\{ \left[\bar{P}_1^2 N_x N_x k_\parallel^2 + P_2^2 N_z M_z k_z^2 + \bar{P}_1 P_2 (N_x M_z k_- + N_z N_x k_+) k_z \right] + \right. \\ \left. + \frac{e}{\hbar c} \left[\bar{P}_1^2 N_x N_x (A_- k_+ + A_+ k_-) + 2P_2^2 N_z M_z A_z k_z + \right. \right. \\ \left. \left. + \bar{P}_1 P_2 (N_x M_z A_- + N_z N_x A_+) k_z + \bar{P}_1 P_2 (N_x M_z k_- + N_z N_x k_+) A_z \right] + \right. \\ \left. + \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 \left[\bar{P}_1^2 N_x N_x A_\parallel^2 + P_2^2 N_z M_z A_z^2 + \bar{P}_1 P_2 (N_x M_z A_- + N_z N_x A_+) A_z \right] \right\} . \quad (\text{E.21})$$

Novamente, recorrendo ao conjunto de equações (E.9), (E.14), (E.15) e (E.17), após algumas manipulações algébricas somos conduzidos ao resultado

$$\mathbb{M}_2 \mathbb{M}_2^\dagger = \frac{\bar{P}_1^2}{6} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \left(\mathbf{k}_\parallel + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_\parallel \right)^2 + \frac{2P_2^2}{3} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right)^2 + \\ + \frac{\bar{P}_1 P_2}{3} \left(\Sigma + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_\parallel \cdot \sigma \right) \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right) . \quad (\text{E.22})$$

Finalmente, vamos repetir todo o procedimento desenvolvido para os demais produtos e calcular $\mathbb{M}_3 \mathbb{M}_3^\dagger$,

$$\mathbb{M}_3 \mathbb{M}_3^\dagger = \frac{1}{3} \left\{ \left[\bar{P}_1^2 \Sigma^2 + \bar{P}_1 P_2 (\sigma_z \Sigma + \Sigma \sigma_z) k_z + P_2^2 \mathbf{1}_{2 \times 2} k_z^2 \right] + \frac{e}{\hbar c} \bar{P}_1 P_2 (\Sigma \sigma_z + \sigma_z \Sigma) A_z + \right. \\ \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 \left[\bar{P}_1^2 (\mathbf{A}_\parallel \cdot \sigma)^2 + \bar{P}_1 P_2 [(\mathbf{A}_\parallel \cdot \sigma) \sigma_z + \sigma_z (\mathbf{A}_\parallel \cdot \sigma)] A_z + P_2^2 \mathbf{1}_{2 \times 2} A_z^2 \right] + \\ \left. + \frac{e}{\hbar c} \left[\bar{P}_1^2 [\Sigma (\mathbf{A}_\parallel \cdot \sigma) + (\mathbf{A}_\parallel \cdot \sigma) \Sigma] + 2P_2^2 \mathbf{1}_{2 \times 2} A_z k_z + \bar{P}_1 P_2 [(\mathbf{A}_\parallel \cdot \sigma) \sigma_z + \sigma_z (\mathbf{A}_\parallel \cdot \sigma)] k_z \right] \right\} . \quad (\text{E.23})$$

Para simplificar este resultado basta reescrever o operador helicidade Σ em termos de sua representação matricial explícita e fazer os produtos com a matriz de Pauli σ_z . Assim, temos

$$\mathbb{M}_3 \mathbb{M}_3^\dagger = \frac{1}{3} \left[\bar{P}_1^2 \left(\mathbf{k}_\parallel + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_\parallel \right)^2 + P_2^2 \left(k_z + \frac{e}{\hbar c} A_z \right)^2 \right] \mathbf{1}_{2 \times 2} . \quad (\text{E.24})$$

Comparando os resultados indicados nas equações (E.20), (E.22) e (E.24), o leitor pode facilmente notar o seguinte vínculo

$$2\mathbb{M}_3\mathbb{M}_3^\dagger = \mathbb{M}_1\mathbb{M}_1^\dagger + \mathbb{M}_2\mathbb{M}_2^\dagger . \quad (\text{E.25})$$

Esta equação será muito útil durante o cálculo do hamiltoniano efetivo que descreve o elétron de condução, tanto em primeira quanto em segunda ordem de aproximação no inverso do gap de energia.

Apêndice F

Evolução temporal do operador posição

Apesar de ligeiramente breve, a idéia deste apêndice se resume no cálculo detalhado de produtos matriciais que surgem na equação que descreve a evolução temporal das coordenadas do operador posição,

$$\bar{X}_j(t) = [\Lambda U(t)]^\dagger X_j [\Lambda U(t)] = X_j \mathbf{1}_{2 \times 2} + i[\Lambda U(t)]^\dagger \frac{\partial}{\partial k_{x_j}} [\Lambda U(t)] , \quad (\text{F.1})$$

onde $j = 1, 2$ e ainda $(x_1, x_2) = (x, y)$. Vamos então começar reescrevendo a matriz Λ dada na equação (4.2) deixando explícita sua dependência com as componentes do vetor de onda,

$$\Lambda = \frac{(k_x - ik_y)}{\sqrt{2(k_x^2 + k_y^2)}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} . \quad (\text{F.2})$$

O leitor deve se lembrar que esta matriz caracteriza a transformação de similaridade que diagonaliza o operador helicidade no plano. Com a ajuda do operador evolução dado em (7.5), agora estamos prontos para começar o cálculo do produto matricial indicado na equação (F.1),

$$\Lambda U(t) = \frac{(k_x - ik_y)}{\sqrt{2(k_x^2 + k_y^2)}} e^{-i\omega_+ t} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_- t} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} . \quad (\text{F.3})$$

O próximo passo consiste em atuar a derivada nas componentes (k_x, k_y) do vetor de onda no produto obtido na equação (F.3). Já que as frequências $w_{\pm}$ dadas em (7.6) são funções do módulo $k_{||}$ do vetor de onda no plano, dada uma componente k_{x_i} arbitrária temos

$$\frac{\partial \omega_{\pm}}{\partial k_{x_i}} = \hbar \left(\frac{M_{||} \pm m_{||}}{m_{||} M_{||}} \right) k_{x_i} . \quad (\text{F.4})$$

No intuito de tornar as expressões mais concisas, definiremos duas novas massas,

$$\frac{1}{m_1} = \frac{M_{||} + m_{||}}{m_{||} M_{||}} , \quad \frac{1}{m_2} = \frac{M_{||} - m_{||}}{m_{||} M_{||}} , \quad (\text{F.5})$$

o que na certa permite escrever as derivadas para ambas frequências de uma forma bem mais econômica,

$$\frac{\partial \omega_{+}}{\partial k_{x_i}} = \frac{\hbar}{m_1} k_{x_i} , \quad \frac{\partial \omega_{-}}{\partial k_{x_i}} = \frac{\hbar}{m_2} k_{x_i} . \quad (\text{F.6})$$

Ao tomar a derivada da equação (F.3) nas componentes do vetor de onda teremos dois termos para nos preocupar. O primeiro deles é dado pela derivada das exponenciais complexas indicadas e, graças a equação (F.6), é de fácil manuseio,

$$\frac{\partial}{\partial k_{x_i}} e^{-i\omega_{+}t} = -i \frac{t\hbar}{m_1} k_{x_i} e^{-i\omega_{+}t} , \quad \frac{\partial}{\partial k_{x_i}} e^{-i\omega_{-}t} = -i \frac{t\hbar}{m_2} k_{x_i} e^{-i\omega_{-}t} . \quad (\text{F.7})$$

Em virtude de também depender das coordenadas k_x e k_y , o segundo termo que requer atenção é dado em função dos coeficientes fracionários que acompanham as matrizes presentes na equação (F.3). Assim, agregando todas as informações que encontramos nas linhas acima, temos

$$\frac{\partial}{\partial k_x} \left[\frac{(k_x - ik_y)}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} e^{-i\omega_{+}t} \right] = +e^{-i\omega_{+}t} \left[\frac{(k_y + ik_x) k_y}{(k_x^2 + k_y^2)^{3/2}} - i \frac{t\hbar}{m_1} \frac{(k_x - ik_y) k_x}{(k_x^2 + k_y^2)^{1/2}} \right] , \quad (\text{F.8})$$

e

$$\frac{\partial}{\partial k_y} \left[\frac{(k_x - ik_y)}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} e^{-i\omega_{+}t} \right] = -e^{-i\omega_{+}t} \left[\frac{(k_y + ik_x) k_x}{(k_x^2 + k_y^2)^{3/2}} + i \frac{t\hbar}{m_1} \frac{(k_x - ik_y) k_y}{(k_x^2 + k_y^2)^{1/2}} \right] . \quad (\text{F.9})$$

Além de alguns poucos sinais, as eventuais diferenças entre estas expressões estão no ordenamento das componentes do vetor de onda em relação as frações indicadas, o que atribui um caráter simétrico ao par de equações. Utilizando as equações (F.8) e (F.9), podemos agora calcular explicitamente a derivada da equação (F.3) relativamente as coordenadas

do vetor de onda no plano, ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial k_x} [\Lambda U(t)] = & + \frac{e^{-i\omega_+ t}}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{(k_y + ik_x) k_y}{(k_x^2 + k_y^2)^{3/2}} - i \frac{t\hbar}{m_1} \frac{(k_x - ik_y) k_x}{(k_x^2 + k_y^2)^{1/2}} \right\} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \\ & - \frac{i}{\sqrt{2}} \frac{t\hbar}{m_2} k_x e^{-i\omega_- t} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{F.10}) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial k_y} [\Lambda U(t)] = & - \frac{e^{-i\omega_+ t}}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{(k_y + ik_x) k_x}{(k_x^2 + k_y^2)^{3/2}} + i \frac{t\hbar}{m_1} \frac{(k_x - ik_y) k_y}{(k_x^2 + k_y^2)^{1/2}} \right\} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \\ & - \frac{i}{\sqrt{2}} \frac{t\hbar}{m_2} k_y e^{-i\omega_- t} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{F.11}) \end{aligned}$$

Para concluir, resta apenas substituir (F.3), (F.10) e (F.11) na equação (F.1) e especificar os casos em que $j = 1$ e $j = 2$. Assim, temos finalmente condições de determinar a evolução temporal do operador posição,

$$\begin{aligned} [\Lambda U(t)]^\dagger \frac{\partial}{\partial k_x} [\Lambda U(t)] = & + \frac{i}{2} \left\{ \frac{k_y}{k_{||}^2} - \frac{(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} t\hbar k_x \right\} \mathbb{1}_{2 \times 2} + \\ & - \frac{i}{2} \left\{ \frac{k_y}{k_{||}^2} + \frac{(m_1 - m_2)}{m_1 m_2} t\hbar k_x \right\} \sigma_x, \quad (\text{F.12}) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} [\Lambda U(t)]^\dagger \frac{\partial}{\partial k_y} [\Lambda U(t)] = & - \frac{i}{2} \left\{ \frac{k_x}{k_{||}^2} + \frac{(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} t\hbar k_y \right\} \mathbb{1}_{2 \times 2} + \\ & + \frac{i}{2} \left\{ \frac{k_x}{k_{||}^2} - \frac{(m_1 - m_2)}{m_1 m_2} t\hbar k_y \right\} \sigma_x. \quad (\text{F.13}) \end{aligned}$$

Observe que cada um dos produtos em (F.12) e (F.13) depende linearmente na coordenada temporal t . Em outras palavras, visto que estamos restritos ao hamiltoniano efetivo em primeira ordem de aproximação no inverso do gap de energia, este par de equações é a evidência de que o modelo de uma subbanda não apresenta o efeito *Zitterbewegung*.