### UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

#### DENIS RICARDO CANDIDO

Relaxação de spin via D'yakonov-Perel' em poços quânticos com acoplamento spin-órbita intersub-banda

São Carlos

2013

#### DENIS RICARDO CANDIDO

# Relaxação de spin via D'yakonov-Perel' em poços quânticos com acoplamento spin-órbita intersub-banda

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

Área de concentração: Física Básica Orientador: Prof. Dr. José Carlos Egues

Versão Corrigida

São Carlos

2013

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

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Candido, Denis Ricardo Relaxação de spin via D\'yakonov-Perel\' em poços quânticos com acoplamento spin-órbita intersub-banda / Denis Ricardo Candido; orientador José Carlos Egues - versão corrigida -- São Carlos, 2013. 227 p. Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2013. 1. Interação spin-órbita. 2. Poços quânticos em diferentes direções de crescimento. 3. Hamiltoniano efetivo para poços quânticos. 4. Acoplamento intersubbanda. 5. Relaxação de spin via mecanismo de D\'yakonov-Perel\'. I. Egues , José Carlos , orient. II. Título.

#### AGRADECIMENTOS

Primeiramente, gostaria de agradecer aos meus pais não só pela base e apoio mas também por todo o amor, carinho e suporte que me deram durante a vida, tornando esta de certa maneira mais fácil e prazerosa. Amo vocês! Agradeço também aos meus irmãos, duas pessoas sensacionais a qual eu tenho muito orgulho de ter em minha vida. Amo vocês! Aos meus avós, por serem de certa maneira como pais pra mim. Obrigado pelo apoio. Amo vocês!

A todos os amigos de Leme: Testa, Krew, Milton, Baleia, Pitiko, Venom, Dailton, Bujão e Chuck. A todos os colegas da turma do Bacharelado em Física de 2007. Em especial: Marcello, Jordan, Lulão, Guilher e Jay. Aos colegas de mestrado Tiaguinho e Gules.

Ao colega de sala e amigo, Marcão, pelas diversas dicas, ajudas, discussões e troca de idéias. Ao Fu, pelas discussões físicas e principalmente pelo fornecimento dos resultados numéricos obtidos de forma auto-consistente. Gostaria de agradecer também à Poliana, pelas dicas, discussões, pelo convite de visita ao grupo de pesquisa onde hoje estou e principalmente pela ajuda indispensável na elaboração/escrita e correção da tese. Este trabalho não poderia ter sido feito sem a ajuda de vocês.

Agradeço também ao Rodrigo Veiga por disponibilizar o modelo latex de sua dissertação.

À toda família Associação Esportiva Rugby São Carlos, que defendem e honram com sangue o nome que representam. Obrigado por todas as experiências que junto passamos, a troca de idéias, as risadas, as brejas, as baladas, as viagens e as loucuras. Levo vocês como uma segunda família. Em especial: Glauco, Tarja, Pastel, Rocko, Jean, Jimmie, Vinícius, Jamanta, Leo, Bayer e os juvenas.

À sempre atenciosa e prestativa Cris, auxiliando e ajudando quando necessário. À Neusa da biblioteca, ao Silvio, Ricardo e Ítalo, pela ajuda, dedicação e paciência. Ao professor Esmerindo pela ajuda no entendimento da Teoria de grupos.

Ao orientador J. C. Egues, por todo o apoio, confiança, paciência, ensinamento e pelas incríveis oportunidades proporcionadas no meio acadêmico.

Ao professor da Universidade de Basel, Daniel Loss e novamente ao Egues pela oportunidade e hospitalidade dadas na minha estadia de um mês na Suíça, onde tive incríveis experiências acadêmicas além de úteis e indispensáveis discussões.

Adicionalmente, relembro e agradeço a infra-estrutura disponibilizada pela USP e pelo IFSC, bem como o apoio financeiro do CNPq.

Minhas sinceras desculpas caso tenha esquecido de alguém.

"For me I think the greatest achievement of the science, is to allow humanity to realize that our world is comprehensible, that through science, through rational thinking, we can understand how the universe works. If you don't understand how the world works then everything is a mystery to you. And If everything is magical and mysterious then... then you really don't work on logic anymore then everything is about belief. Our sanity to some degree depends on understanding of what goes around us, it isn't just blind fates there are reasons for lots of things, reason is science. Understand the reasons of things is science.."

> Brave New World with Stephen Hawking (2011)

#### Resumo

CANDIDO, D. R. Relaxação de spin via D'yakonov-Perel' em poços quânticos com acoplamento spin-órbita intersub-banda. 2013. 230 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

Em sistemas com acoplamento spin-órbita (SO) é possível manipular eletricamente o spin do elétron via a aplicação de um campo elétrico.<sup>1</sup> Isso permite a potencial aplicação do grau de liberdade de spin (Spintronica) no desenvolvimento de novos dispositivos e tecnologias, como por exemplo na tecnologia da informação (computação guântica).<sup>2,3</sup> No entanto, sabe-se que a interação SO causa efeitos indesejáveis, como por exemplo a relaxação e o defasamento de spin.<sup>4</sup> Dessa maneira, do ponto de vista de aplicações, tornase desejável maximizar o tempo de vida do spin. Neste trabalho, investigamos a relaxação de spin dos elétrons de condução em poços guânticos com duas sub-bandas<sup>5</sup> crescidos ao longo das direções [001] e [110] via o mecanismo de D'yakonov-Perel'.<sup>6</sup> Combinando teoria de grupos, o método k.p, a aproximação da função envelope e teoria de perturbação de Löwdin obtemos um Hamiltoniano efetivo para os elétrons da banda de condução na presença das interações SO de Rashba e Dresselhaus. Aqui, diferentemente de alguns trabalhos anteriores,<sup>7,8</sup> além de incluir o termo cúbico de Dresselhaus, também levamos em conta as contribuições devido à influência da segunda sub-banda de mais baixa energia do poço. A partir deste Hamiltoniano derivamos expressões para os tempos de relaxação do spin e analisamos como estas novas contribuições (termos do acoplamento com a segunda sub-banda) afetam os tempos de vida dos spins. Comparamos os tempos de relaxação para as direções [001] com os calculados para a direção [110]. Nossos resultados mostram que as contribuições devido à segunda sub-banda são desprezíveis para ambas as direções. Mostramos também que o tempo de relaxação para a direção [110] é mais longo que o da [001], resultado consistente com experimentos<sup>9,10</sup> e outros trabalhos teóricos anteriores.<sup>7</sup>

**Palavras-chave:** Interação spin-órbita. Hamiltoniano efetivo para poços quânticos. Poços quânticos em diferentes direções de crescimento. Acoplamento intersub-banda. Relaxação de spin via mecanismo de D'yakonov-Perel'.

#### Abstract

CANDIDO, D. R. D'yakonov-Perel' Spin Relaxation in Quantum Wells with Intersubband Spin-Orbit Interaction. 2013. 230 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

In systems with spin-orbit (SO) coupling, it is possible to electrically manipulate the electron spin via applied gate voltages.<sup>1</sup> This allows for the potential use of the spin degree of freedom (Spintronics) in the development of new devices and technologies, for instance information technology (quantum computing).<sup>2,3</sup> It is known however, that the SO interaction leads to the undesired effect of causing spin relaxation and spin dephasing.<sup>4</sup> Thus from the point of view of applications, it is desirable to maximize the spin lifetimes. Here, we investigate the spin relaxation of the conduction electrons in quantum wells with two sub-bands<sup>5</sup> grown along the [001] and [110] directions via the D'yakonov-Perel' mechanism.<sup>6</sup> By combining group theory, the k.p method, the envelope function approach and the Löwdin perturbation theory, we obtain an effective Hamiltonian for the conduction electrons in the presence of the Rashba and Dresselhaus SO interactions. Differently from some early works,<sup>7,8</sup> in addition to the cubic Dresselhaus term, we also account for the contributions arising from the second lowest sub-band of the well. We derive expressions for the spin relaxation times and analyze how the new contributions (second sub-band terms) affect the spin lifetimes. We compare the relaxation times obtained in the [001] direction with those calculated for the [110] direction. Our results show that the contributions from the second sub-band are negligible for both directions. We also find that the relaxation time in the [110] direction is longer than the one in the [001], a result consistent with experiments<sup>9,10</sup> and earlier theoretical works.<sup>7</sup>

**Keywords:** Spin-orbit interaction. Effective Hamiltonian for quantum wells. Quantum wells in different growth directions. Intersubband coupling. D'yakonov-Perel' spin-relaxation mechanism.

### LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Representação esquemática da energia das bandas e as respectivas simetrias dos autoestados. Nota-se que não representamos aqui todas as bandas envolvidas.	46
Figura 2.2 - Gráfico das estruturas de Bandas dos materiais (a) GaAs. (b) InSb. A linha tra- cejada faz referência à diagonalização da matriz (A.26) enquanto a linha contínua faz referência à diagonalização da matriz (2.93).	53
Figura 2.3 - Gráfico das estruturas de Bandas dos materiais (a) HgTe. (b) CdTe. A linha tra- cejada faz referência à diagonalização da matriz (A.26) enquanto a linha contínua faz referência à diagonalização da matriz (2.93).	54
Figura 3.1 – Arranjo das células de zincblendeee de um poço crescido na direção cristalográfica         [001].	56
Figura 3.2 – Representação esquemática dos offsets das bandas de condução e valência para os poços simples do tipo I	56
Figura 4.1 – Grafíco que ilustra as energias $\varepsilon_{k_{\parallel},0,\sigma}$ e $\varepsilon_{k_{\parallel},1,\sigma}$ . Ambos os eixos estão em unidades arbitrárias.	78
Figura 5.1 – Influência do Hamiltoniano de Rashba sobre os autovalores	93
Figura 5.2 – Influência do Hamiltoniano de Dresselhaus sobre os autovalores	94
Figura 6.1 – Representação esquemática da relaxação de spin via mecanismo de D'yakonov- Perel' em um 2DEG. As bolas e flechas vermelhas representam os elétrons e seus respectivos spins. As flechas azuis representam a direção do campo $\vec{\Omega}(\vec{k})$ e as bolas pretas representam as impurezas, i.e., os centros espalhadores de elétrons.	108

Figura 7.1 -	Esquema da nossa estrutura $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ com tamanho do poço $L_w$ e tamanho total 2L. A estrutura possui densidade de doadores sime- trico $\rho_d$ , dispostos simetricamente à uma distância $L_d$ do poço. A região cinza representa os gates metálicos, responsáveis pelas diferença de potencia aplicado $V_G(-L)$ e $V_G(L)$ .	150
Figura 7.2 -1	Funções envelope $\langle r   i \rangle = \psi_i$ para a largura do poço quântico (a) 15nm (b)30nm. Aqui só temos a ocupação da primeira banda, $V_G(L) - V_G(-L) = 0.15eV$ , $n_e = 0.002 (\text{nm})^{-2}$ e $n_d = 0.001 (\text{nm})^{-2}$ .	151
Figura 7.3 -1	Perfis dos potenciais: eletrônico $V_e$ , externo somado ao potencial dos doado- res $V_g$ , auto-consistente $V_s c$ e heteroestrutural $V_w$ para dois tamanhos de poços diferentes, com elétrons ocupando somente a primeira banda (a) 15nm (b)30nm. Utilizamos aqui $n_e = 0.002 \text{ (nm)}^{-2}$ e $n_d = 0.001 \text{ (nm)}^{-2}$ .	151
Figura 7.4 -1	Perfis dos parâmetros $\alpha's$ e $\beta's$ em função do gate aplicado, com elétrons ocupando somente a primeira banda de energia. (a) 15nm (b) 30nm. Utilizamos aqui $n_e =$ 0.002 (nm) <sup>-2</sup> e $n_d = 0.001$ (nm) <sup>-2</sup> . O parâmetro $\beta_3$ não foi mostrado no gráfico uma vez que este é uma constante em função de $V_g$ .	153
Figura 7.5 -   	Perfil do parâmetro $\beta_{2,3}$ em função do gate aplicado, com elétrons ocupando somente a primeira banda de energia. (a) 15nm (b) 30nm. Utilizamos aqui $n_e = 0.002 (\text{nm})^{-2}$ e $n_d = 0.001 (\text{nm})^{-2}$ .	154
Figura 7.6 -	Perfis dos parâmetros $\alpha's \in \beta's$ em função do tamanho do poço quântico $L_w$ fixado $\Delta V_g = 0.10 eV$ . Utilizamos aqui $n_e = 0.002 (\text{nm})^{-2}  \text{e}  n_d = 0.001 (\text{nm})^{-2}  \dots  \dots$	155
- Figura 7.7 (	Perfil do parâmetro $\beta_{2,3}$ em função do tamanho do poço quântico $L_w$ fixado $\Delta V_g = 0.10 eV$ . Utilizamos aqui $n_e = 0.002 (\text{nm})^{-2} \text{e} n_d = 0.001 (\text{nm})^{-2}$	155
Figura 7.8 - I	Funções envelope $\langle r   i \rangle = \psi_i$ para a largura do poço quântico (a) 15nm (b)30nm. Aqui temos a ocupação dos elétrons na primeira e na segunda banda parcialmente, $V_G(L) - V_G(-L) = 0.15eV$ , $n_e = 0.012 (\text{nm})^{-2}$ e $n_d = 0.006 (\text{nm})^{-2}$ .	156
Figura 7.9 - I	Perfis dos potenciais: eletrônico $V_e$ , externo somado ao potencial dos doadores $V_g$ , auto-consistente $V_{sc}$ e heteroestrutural $V_w$ para dois tamanhos de poços diferentes, com elétrons ocupando a primeira e a segunda banda parcialmente (a) 15nm (b)30nm. Utilizamos aqui $n_e = 0.012 (\text{nm})^{-2}$ e $n_d = 0.006 (\text{nm})^{-2}$	157
Figura 7.10 - G	Perfis dos parâmetros $\alpha's \in \beta's \in m$ função do gate aplicado, com elétrons ocupando a primeira e parcialmente segunda banda de energia. (a) 15nm (b) 30nm. Utilizamos aqui $n_e = 0.012 (\text{nm})^{-2}$ e $n_d = 0.006 (\text{nm})^{-2}$ . O parâmetro $\beta_3$ não foi mostrado no gráfico uma vez que este é uma constante em função de $V_g$	158
Figura 7.11 - G	Gráfico do parâmetro $\beta_{2,3}$ em função do gate aplicado, com elétrons ocupando somente a primeira banda de energia. (a) 15nm (b) 30nm. Utilizamos aqui $n_e = 0.012 (nm)^{-2}$ e $n_d = 0.006 (nm)^{-2}$	158
- Figura 7.12	Perfis dos parâmetros $\alpha's \in \beta's$ em função do tamanho do poço quântico $L_w$ fixado $\Delta V_g = 0.10 eV.$	159
- Figura 7.13 (	Perfis do parâmetro $\beta_{2,3}$ em função do tamanho do poço quântico $L_w$ fixado $\Delta V_g = 0.10 eV$ . Utilizamos aqui $n_e = 0.002 (nm)^{-2}$ e $n_d = 0.001 (nm)^{-2}$	159

Figura 7.14	- Dependência dos parâmetros de Rashba e Dresselhaus intra e interbanda em função de $k_F$ para $L_w = 15nm$ . O parâmetro $\beta_3$ não foi incluido nesse gráfico uma vez que sabemos a dependência deste com $k_F$ , $\beta_3 = \frac{\gamma k_F^2}{4}$ . $k_F = 0.012$ Å corresponde à densidade eletrônica $n_e = 0.002 (\text{nm})^{-2}$ e $k_F = 0.027$ Å corresponde à $n_e = 0.012 (\text{nm})^{-2}$ .	161
Figura 7.15	– Tempos de relaxação para um poço quântico com $L_w = 15$ nm crescido na di- reção [001] em função da densidade eletrônica $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.2).	162
Figura 7.16	-Contribuições das taxas de relaxação $\Gamma_{zz}$ para um poço quântico com $L_w = 15nm$ crescido na direção [001] em função da densidade eletrônica $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.2). As curvas vermelha e preta estão sobrepostas uma vez que a diferença numérica entre elas é imperceptível nesta escala.	163
Figura 7.17	-Contribuições das taxas de relaxação $\Gamma_{\pm}$ para um poço quântico com $L_w = 15nm$ crescido na direção [001] em função da densidade eletrônica $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.2). As curvas vermelha e preta estão sobrepostas uma vez que a diferença numérica entre elas é imperceptível nesta escala.	163
Figura 7.18	- Tempos de relaxação para um poço quântico com $L_w = 15nm$ crescido na di- reção [110] em função da densidade eletrônica $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.3). As curvas azul e vermelhas mesmo possuindo diferentes expressões algebricas, (como pode ser visto em (6.115) e (6.116)) estão sobrepostas na escala utilizada	165
Figura 7.19	-Contribuições das taxas de relaxação $\Gamma_{xx}$ , $\Gamma_{yy}$ para um poço quântico com $L_w = 15nm$ crescido na direção [110] em função da densidade eletrônica $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.3). As curvas vermelha e preta estão sobrepostas uma vez que a diferença numérica entre elas é imperceptível nesta escala.	166
Figura 7.20	-Contribuições das taxas de relaxação $\Gamma_{zz}$ , $\Gamma_{xz}$ para um poço quântico com $L_w = 15nm$ crescido na direção [110] em função da densidade eletrônica $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.3). As curvas vermelha e preta estão sobrepostas uma vez que a diferença numérica entre elas é imperceptível nesta escala.	167
Figura A.1	– Estrutura cristalina Zincblende com os eixos $\hat{x}, \hat{y}$ e $\hat{z}$ paralelos respectivamente às direções cristalográficas [001], [010] e [001].	180
Figura A.2	– Vizinhos próximos de um átomo em uma estrutura cristalina de Zincblende	181
Figura A.3	- Simetrias. <http: azufre.quimica.uniovi.es="" d-molsym=""> Acesso em Fev. 2012 .</http:>	182

Figura C.1 – Figura que mostra a disposição de dois diferentes eixos coordenados em relação	
aos eixos cristalográficos. A relação dos eixos coordenados vermelho e azul são	
relacionados aos eixos cristalográficos via Tab. (C.1)	203

### LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Tabela contendo as massas obtidas via modelo de Kane junto com obtidas experimentalmente.         rimentalmente.	52
Tabela 6.1 - Tabela comparando as taxas de relaxação $\Gamma_{zz}$ e $\Gamma_{\pm}$ obtidos usando nosso modelosem acoplamento intersubbanda com os tempos de outras referências.	133
Tabela 6.2 - Tabela comparando as taxas de relaxação $\Gamma_{xx}$ , $\Gamma_{yy}$ , $\Gamma_{zz}$ e $\Gamma_{xz}$ obtidos usandonosso modelo sem acoplamento intersubbanda com os tempos de outras referências. $C = \frac{4\tau_1 m^*}{\hbar^4} E_F$	147
Tabela 7.1 – Tabela com as definições dos parâmetros de Rashba e Dresselhaus intra e inter- subbanda.         subbanda.	152
Tabela 7.2 – Tabela com os valores dos parâmetros utilizados para o cálculo dos tempos de relaxação utilizando $n_e = 0.002(nm)^{-2}$ , $L_w = 15nm$ e $V_G(L) = 0.10eV$	161
Tabela 7.3 – Tabela com os valores dos parâmetros utilizados para o cálculo dos tempos de relaxação utilizando $n_e = 0.002(nm)^{-2}$ , $L_w = 15nm$ e $V_G(L) = 0.10eV$	164
Tabela A.1 – Tabela de caractere para o grupo simples $T_d$ .	181
Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples Tabela A.2 - Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples A.2 - Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples A.2 - Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples A.2 - Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples A.2 - Tabela A.2 - Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples A.2 - Tabela A.2 - Tabela do produtíveis do grupo simples A.2 - Tabela do produtíveis do grupo simples A.2 - Tabela do grupo simples A.2 - Tabela do produto simples A.2	, 187
Tabela A.3 - Tabela que mostra a base do momento angular total	190
Tabela B.1 – Tabela que contém as base $ P_i\rangle$ e $ P'_i\rangle$ , autoestados de $\mathcal{H}_0$ em dois diferenteseixos coordenados	197
Tabela C.1 – Tabela com a orientação dos eixos cartesianos em relação aos eixos cristalográ- ficos para as direções de crescimento [001] e [110].	204

## SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO				
	1.1	Outline do trabalho	28	
2	EQI	JAÇÃO DE DIRAC E O MÉTODO K.P	31	
	2.1	Equação de Dirac e o Hamiltoniano Spin-Órbita	32	
	2.2	Método k.p	36	
	2.3	Teoria de perturbação de Löwdin	39	
	2.4	Folding down	41	
	2.5	Abordagem por Winkler e Pikus	43	
	2.6	Hamiltoniano de Luttinger 6x6	44	
	2.7	Hamiltoniano de Kane estendido 8x8 e renormalização dos parametros de		
		Luttinger	47	
	2.8	Diagonalização da matriz $\mathcal{H}^{8 imes 8}_{ AM angle}$ e obtenção das estruturas de bandas	52	
3	APF	ROXIMAÇÃO DA FUNÇÃO ENVELOPE (EFA) E O HAMILTONIANO		
	RA UMA HETEROESTRUTURA	55		
	3.1	Aproximação da função envelope (EFA)	55	

		3.1.1	Conside	rações e hipóteses sobre a EFA	56	
		3.1.2	Derivaçã	ão das equações de massa efetiva e do Hamiltoniano efetivo	57	
		3.1.3	Hamilto	niano para heteroestruturas zincblende	59	
			3.1.3.1	Cálculo do termo $\langle S   \mathcal{H}^{rem}   S  angle$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	59	
			3.1.3.2	Cálculo do termo $\langle X   \mathcal{H}^{rem}   X  angle$	60	
			3.1.3.3	Cálculo do termo $\langle X   \mathcal{H}^{rem}   Y  angle$	63	
		3.1.4	Determi	nação da matriz estendida de Kane para heteroestruturas .	65	
		3.1.5	Método	ad-hoc/Simetrização	71	
		3.1.6	Utilizaç	ão da simetrização de forma incorreta	72	
			3.1.6.1	Simetrização do termo $\langle X   \mathcal{H}^{DKK}   Y  angle$	73	
			3.1.6.2	Simetrização do termo $ar{S}^L_\pm$	73	
4	HAN Fef	MILTON	NIANOS S DIREÇ	EFETIVOS PARA A BANDA DE CONDUÇÃO EM DI- ÇÕES	75	
	4.1	Hamil	toniano d	lo poço quântico crescido na direção [001] com correção da	70	
		massa	do elétro	on	76	
	4.2	Poten	cial de H	artree e o cálculo auto-consistente	76	
	4.3	Hamil	toniano d	e Rashba na direção de crescimento [001]	78	
	4.4	Hamil	toniano d	e Dresselhaus na direção [001]	79	
	4.5	Hamil	tonianos	efetivos na direção de crescimento [110]	82	
5	OBTENÇÃO DOS HAMILTONIANOS EFETIVOS PARA 2DEGs EM DIFE-					
	REN	NTES [	DIREÇÕE	ES DE CRESCIMENTO	85	
	5.1	Projeç	ão		85	
	5.2	Hamil	toniano	$\left(\vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \middle  \mathcal{H}_{2DEG}^{[001]} \middle  \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right)_{[001]} \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots$	86	
		5.2.1	Cálculo	da contribuição devido à $\left\langle ec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right  \mathcal{H}^{[001]}_{Rashba} \left  ec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[001]}$ .	86	

		5.2.2	Cálculo da contribuição devido à $\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right  \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]} \left  \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[001]}$	88
			5.2.2.1 Nulidade das constantes $\beta_{n,1}$ e $\beta_{n,3}$ e redefinição das con-	
			tantes $eta$	90
		5.2.3	Hamiltoniano efetivo para a primeira subbanda $ k,0,\uparrow(\downarrow) angle_{[001]}$	93
	5.3	Hamilt	toniano $\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \middle  \mathcal{H}_{2DEG}^{[110]} \middle  \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[110]}$	96
		5.3.1	Cálculo da contribuição devido à $\left< ec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right  \mathcal{H}_{Rashba}^{[110]} \left  ec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right>_{[110]}$ .	96
		5.3.2	Cálculo da contribuição devido à $\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right  \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} \left  \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[110]}$	) 97
		5.3.3	Hamiltoniano efetivo para a primeira subbanda $ k,0,\uparrow(\downarrow) angle_{_{[110]}}$	104
6	ME	CANISI	MO DE RELAXAÇÃO DE SPIN VIA D'YAKONOV-PEREL'	107
	6.1	D'akor	nov-Perel'	108
		6.1.1	Descrição do mecanismo e suas principais características	108
		6.1.2	Equação de Boltzmann	110
		6.1.3	Espalhamento elástico	113
		6.1.4	Equação de Boltzmann com a inclusão de espalhamento elástico .	114
		6.1.5	Aproximação envolvida na equação (6.27)	116
		6.1.6	Tempo de relaxação para o caso bulk 3D	118
		6.1.7	Tempo de relaxação para o caso de um poço quântico (2D)	125
	6.2	Tempo	de relaxação de spin para um poço quântico crescido na direção [001	]129
			6.2.0.1 Comparação com trabalhos conhecidos [001]	132
	6.3	Tempo	de relaxação de spin em um QW crescido na direção [110]	133
			6.3.0.2 Comparação com trabalhos conhecidos [110]	146
7	RES	SULTAE	005	149
	7.1	Sistem	nas a serem simulados	149
	7.2	Uma b	anda ocupada	150

	7.3	Duas subbandas ocupadas	156	
	7.4	Tempo de relaxação para o poço quântico crescido na direção [001]	160	
	7.5	Tempo de relaxação para o poço quântico crescido na direção [110]	164	
8	CON	NCLUSÕES	169	
	8.1	Conclusões do trabalho	169	
RE	FER	ÊNCIAS	171	
AF	PÊNE	DICES	177	
A BREVE REVISÃO DE TEORIA DE GRUPOS APLICADA AO ESTUDO				
	SEN	AICONDUCTORES	179	
	A.1	Estrutura cristalina zincblende e suas simetrias	179	
	A.2	Estrela de $\vec{k}$ e o grupo do vetor de onda $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	183	
	A.3	Regras de seleção e o cálculo dos elementos de matriz	186	
		A.3.1 Representações matriciais das operações de simetria	187	
В	Muc	lança de base e rotações em um Hamiltoniano	193	
	B.1	Mudança de base $ P\rangle \rightarrow  AM\rangle$	195	
	B.2	Mudança de base $ P\rangle \rightarrow  P'\rangle$	196	
	<b>B</b> .3	Mudança de base $ AM\rangle \rightarrow  AM'\rangle$	199	
	B.4	Rotação de Hamiltoniano via operadores exponenciais	200	
С	Obte	enção do Hamiltoniano Dresselhaus com $\hat{z}$ na direção [110]	203	
D	Obte	enção do Hamiltoniano de Rashba em qualquer direção	207	
E	Cálo	ulo dos elementos de matriz utilizando teoria de grupos	209	

E.0.1	1 Acoplamento doas bandas devido à $\mathcal{H}_0$			
	E.0.1.1	Acoplamento de $\Gamma_1^c$ com $\Gamma_1^c$ por $\mathcal{H}_0$ , $\langle s   \mathcal{H}_0   s \rangle$	211	
	E.0.1.2	Acoplamento de $\Gamma_1^c$ com $\Gamma_5^v$ por $\mathcal{H}_0$ , $\langle S   \mathcal{H}_0   X_i \rangle \ldots \ldots$	212	
	E.0.1.3	Acoplamento de $\Gamma_5^{\nu}$ com $\Gamma_5^{\nu}$ por $\mathcal{H}_0$ , $\langle x_i   \mathcal{H}_0   x_j \rangle \ldots \ldots$	212	
E.0.2	Acoplam	nento das bandas devido à $\mathcal{H}_{k.p}$	214	
	E.0.2.1	Acoplamento de $\Gamma_1^c$ com $\Gamma_1^c$ por $\mathcal{H}_{k.p}$ , $\langle s   \mathcal{H}_{k.p}   s  angle$	214	
	E.0.2.2	Acoplamento de $\Gamma_1^c$ com $\Gamma_5^v$ por $\mathcal{H}_{k.p}$ , $\langle s   \mathcal{H}_{k.p}   x_i \rangle$ :	215	
	E.0.2.3	Acoplamento de $\Gamma_5^{v}$ com $\Gamma_5^{v}$ por $\mathcal{H}_{k.p}$ , $\langle x_i   \mathcal{H}_{k.p}   x_j \rangle$	217	
E.0.3	Acoplam	nento das bandas devido à $\mathcal{H}_{SO}$	222	
	E.0.3.1	Acoplamento de $\Gamma_1^c$ com $\Gamma_1^c$ por $H_{SO}$ , $\langle s   H_{SO}   s \rangle$	222	
	E.0.3.2	Acoplamento de $\Gamma_1^c$ com $\Gamma_5^v$ por $\mathcal{H}_{SO}$ , $\langle s   \mathcal{H}_{SO}   x_i \rangle$ :	223	
	E.0.3.3	Acoplamento de $\Gamma_5^{\nu}$ e $\Gamma_5^{\nu}$ por $\mathcal{H}_{SO}$ , $\langle x_i   \mathcal{H}_{SO}   x_j \rangle$ :	223	

### CAPÍTULO 1

#### INTRODUÇÃO

A Spintrônica é um ramo da matéria condensada que explora o uso do spin junto (ou não) à carga dos elétrons em aplicações tecnológicas, tal como o processamento quântico de informação.<sup>3</sup> Atualmente esse ramo se mostra uma das áreas mais importantes na física de semiconductores, tanto pela pesquisa fundamental quanto pelas possíveis aplicações em dispositivos, como por exemplo o transistor de spin<sup>1</sup> e computadores quânticos.<sup>2</sup> Dessa maneira, torna-se interessante o estudo teórico de potencias sistemas a serem utilizados no desenvolvimento de novos dispositivos. Um dos principais sistemas estudados atualmente é o chamado gás de elétrons bidimensional (2DEG, do ingles *two-dimensional electron gas*). Para obtermos este, devemos ter uma heteroestrutura com estruturas de bandas dependente da posição, onde apropriados offsets da banda de condução, serão responsáveis pelo confinamento dos elétrons em níveis discretos de energia.

O estudo de Hamiltonianos 2DEG em poços quânticos com duas subbandas vem sendo foco de pesquisas na área da Spintrônica devido a gama de novos resultados que vem sendo encontrados. Para estes sistemas, foi encontrado um novo termo de acoplamento spin-orbita, similar ao termo de Rashba. Onde o resultado interessante é que este novo termo, diferentemente do termo de Rashba, sobrevive mesmo quando nosso poço se mostra totalmente simétrico.<sup>5</sup> Mostrou-se também, como consequência direta do surgimento deste novo termo, uma condutividade não nula no efeito Hall de spin.<sup>11</sup> Resultado este antigamente desconhecido, uma vez que o termo de Rashba intrabanda gerava uma condutividade nula.<sup>11</sup>

Dessa maneira, como extensão dos trabalhos citados acima, temos como primeiro resultado novo apresentado neste trabalho os Hamiltonianos efetivos para um 2DEG com direções de confinamento [001] e [110], que levam em conta a influência da segunda subbanda via acoplamento dos Hamiltonianos de Rashba e Dresselhaus (Cap. 6).

Sabemos que para haver a possibilidade de aplicação tecnológica destes sistemas, necessitamos que a memória do spin nestes seja a mais longa possível.<sup>4,12</sup> Dessa maneira torna-se possível o processamento da informação (através da polarização de spins) antes que essa "tenda à zero" devido ao mecanismo de relaxação do spin do elétron. Hoje portanto, temos como um dos mais importantes focos de pesquisa na física de semiconductores, a investigação de processos de relaxação de spin<sup>6</sup> em poços quânticos, fios quânticos e pontos quânticos.<sup>2</sup>

Utilizando experimentos e o Hamiltoniano efetivo para uma subbanda, sabe-se que poços quânticos crescidos em diferentes direções cristalográficas, tem diferentes tempos de relaxação.<sup>9,13,14</sup> Para poços quânticos crescidos na direção [001] sabemos que esse tempo é muito pequeno,<sup>9,13</sup> o que torna inviável o processamento de informação por meio desses spins. Esse fato nos faz buscar poços crescidos em outras direções.<sup>9</sup> Onde para poços quânticos crescidos na direção [110] encontramos tempos de relaxação da ordem de *ns*, maior por mais de uma ordem de grandeza quando comparado aos tempos de relaxação de poços quânticos crescidos na direção [001].<sup>9,10</sup>

Sabendo que o tempo de relaxação é calculado teoricamente a partir do Hamiltoniano 2DEG do poço quântico, todos os trabalhos que tratam relaxação de spin para 2DEGs confinados nas direções [001] e [110]<sup>7,9,10,14–18</sup> apenas os fazem considerando o efeito da primeira subbanda de mais baixa energia. Dessa maneira, o segundo resultado novo apresentado neste trabalho é a expressão analítica dos tempos de relaxação de spin para poços quânticos crescidos nas direções [001] e [110] e [110] (Cap. 7) levando em conta agora a influência do acoplamento com a segunda subbanda (Cap. 6).

#### 1.1 Outline do trabalho

Sumarizando então os resultados novos na literatura apresentados nesse trabalho temos: a obtenção dos Hamiltonianos efetivos dos 2DEGs (nas direção [001] e [110])

levando em conta a influência da segunda subbanda (via acoplamento do Hamiltoniano de Rashba e Dresselhaus) e o cálculo dos tempos/taxas de relaxação de spin devido à estes Hamiltonianos. Dessa maneira, o objetivo deste trabalho além da inclusão efetiva da segunda subbanda é observar como esta contribuição altera os resultados físicos já conhecidos na literatura, onde a inclusão efetiva com a segunda subbanda não é levada em conta. Para isso, precisaremos dos capítulos de 2-6 junto aos apêndices A,B,C,D e E, que nos guiam à obtenção dos Hamiltonianos efetivos e ao calculo de relaxação de spin.

Nos apêndices A e E fazemos uma revisão sobre as simetrias do cristal zincblend e a aplicação destas à teoria de grupos, procedimento necessário para a obtenção dos Hamiltonianos em bulk e para heteroestruturas.

No capítulo 2 derivamos o Hamiltoniano de acoplamento spin-órbita via aproximações de baixas energias na equação de Dirac. Também deduzimos o método k.p, onde com o auxílio do apêndice A derivamos o Hamiltoniano para cristais em bulk.

Devido a quebra de simetria perante o vetor da rede de Bravais em heteroestruturas, o Hamiltoniano k.p junto ao teorema de Bloch na direção z não podem mais serem usados. O que nos leva ao uso do formalismo da função envelope para a obtenção do Hamiltoniano para heteroestruturas, abordado no capítulo 3.

No capítulo 4, junto aos apêndices B,C e D derivamos os Hamiltonianos de Rashba e Dresselhaus para a banda de condução com as direções de crescimento [001] e [110]. Aqui também apresentamos o procedimento numérico autoconsistente a qual simularemos estruturas realísticas.

No capítulo 5, utilizando os resultados do capítulo 4. apresentamos uma detalhada derivação dos novos Hamiltonianos efetivos (2DEG) para elétrons confinados nas direções [001] e [110], onde agora levamos em conta a influência da segunda banda de mais baixa energia. Nesse capítulo também são mostrados as constantes de Rashba e Dresselhaus intra e intersubbanda utilizadas para o cálculo da relaxação de spin.

Analisamos também a influência dos novos termos de acoplamento inter e intrasubbanda nos tempo de relaxação de spin já conhecidos referentes a não inclusão efetiva da segunda subbanda. O que torna necessário um estudo completo do principal mecanismo de relaxação de spin em poços quânticos dopados formados por materiais zincblend, o mecanismo de D'yakonov Perel.<sup>4,6,8,12</sup> O mecanismo de relaxação de spin utilizado vem descrito e derivado detalhadamente no capítulo 6, onde nesse mesmo capítulo calculamos os novos tempos de relaxação para os novos Hamiltoniano efetivos obtidos no capítulo 5.

Nossos resultados numéricos são mostrados no capítulo 7, onde simulando um poço quântico realísticos, do tipo  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ , obtemos auto-consistentemente os parâmetros de Rashba e Dresselhaus, intra e intersubbanda. Uma vez obtidos estes parâmetros, calculamos os tempos de relaxação e as contribuições devido a primeira e a segunda subbanda. Por sua vez, vemos que as contribuições da segunda subbanda se mostram insignificantes, uma vez que estas são ~3 ordens de grandezas menor que as contribuições provindas da primeira subbanda.

### CAPÍTULO 2

### EQUAÇÃO DE DIRAC E O MÉTODO K.P

No ramo da Spintrônica, o Hamiltoniano de acoplamento spin-órbita tem uma grande importância Física. Podemos identificá-lo como a causa de diversos fenômenos descobertos teorica e experimentalmente como por exemplo, a estrutura fina no espectro de energias do átomo de Hidrogênio e os "novos" estados da matéria, os chamados isolantes topológicos.<sup>19</sup>

O Hamiltoniano que representa essa interação é dado por

$$\mathcal{H}_{SO} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r}) \cdot \vec{p} , \qquad (2.1)$$

onde  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  e *h* é a constante de Planck,  $m_0$  é a massa do elétron livre, *c* é a velocidade da luz,  $\vec{p}$  é o operador momento do elétron,  $V(\vec{r})$  é o potencial sentido pela partícula (e.g. potencial atômico do átomo ou o potencial periódico de uma rede) e  $\vec{\sigma}$  é o vetor matriz de Pauli, representado por

$$\vec{\sigma} = \hat{x}_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \hat{x}_2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \hat{x}_3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$
(2.2)

Dado a grande importância deste Hamiltoniano em diversos ramos da física e principalmente no física de semicondutores, torna-se necessário e importante do ponto de vista físico, descobrir como e de onde ele surge. Essa dedução sera feita na primeira seção.

Na segunda seção desse capítulo deduziremos o método k.p, um método capaz de

nos dar informações sobre a estrutura de bandas de um material. Este é um método semi-empírico, pois os parâmetros utilizados neste método são obtidos por meio de dados experimentais, cálculos "ab-initio" e "tight binding". Como exemplo, temos o caso da massa efetiva obtida por experimentos de ressonância ciclotrônica<sup>20</sup> e dos "gaps" fundamentais obtidos por emissão de fótons.<sup>21</sup>

#### 2.1 Equação de Dirac e o Hamiltoniano Spin-Órbita

Em Mecânica Quântica não relativística, conhecida como Mecânica Quântica de Schrödinger<sup>22–25</sup> não fazemos o uso do quadro de referência de Lorentz o que corresponde a não considerar o sistema invariante por Lorentz e portanto, inconsistente com a Relatividade Restrita.<sup>26</sup> Uma equação invariante por transformação de Lorentz, exige que as derivadas espaciais e temporal sejam da mesma ordem, pois nas transformações de Lorentz essas são simétricas em relação as coordenadas espaço-temporais. Essa simetria, não é vista na equação de Schrödinger para partícula livre,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(\vec{r},t)\rangle = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}p_{i}^{2}|\psi(\vec{r},t)\rangle.$$
(2.3)

A principal motivação da formulação da teoria quântica relativística é o fato da equação de Schrödinger não fornecer, para altas velocidades ( $v \sim c$ ), resultados de acordo com os experimentos.<sup>27</sup> Ou seja, nesse regime de velocidades a transformação de Lorentz começa a não ser mais aproximadamente a de Galileu, tornando-se necessária então a utilização de uma equação que descreva fenômenos quânticos e que também seja invariante por transformações de Lorentz.<sup>26</sup> Essa teoria é chamada de Mecânica Quântica Relativística.<sup>27–30</sup> Vale frisar aqui que a Mecânica Quântica Relativística não precisa estar de acordo com a Teoria da Relatividade Geral,<sup>26</sup> uma vez que devido a sua baixa intensidade, a gravidade pode ser desprezada quando tratamos fenômenos atômicos.

Dada essa motivação, introduzimos a equação de Dirac para uma partícula livre,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(\vec{r},t)\rangle = \left[c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m_0 c^2\right]|\psi(\vec{r},t)\rangle , \qquad (2.4)$$

onde

$$\alpha_{i} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{2\times2} & \sigma_{i} \\ \sigma_{i} & \mathbf{0}_{2\times2} \end{pmatrix} , \qquad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{2\times2} & \mathbf{0}_{2\times2} \\ \mathbf{0}_{2\times2} & \mathbf{1}_{2\times2} \end{pmatrix}.$$
(2.5)

Na presença de um campo eletromagnético, devemos adicionar a equação (2.4) o termo  $q\phi(\vec{r})$  correspondente a energia potencial devido ao campo e realizar a troca  $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}$ , conhecido como acoplamento mínimo. Esse mesmo procedimento também é feito no caso clássico.<sup>28,31–33</sup> Realizando então o acoplamento mínimo, obtemos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(\vec{r},t)\rangle = \left[c\vec{\alpha}\cdot\left(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}\right) + \beta m_0 c^2 + q\phi(\vec{r})\right]|\psi(\vec{r},t)\rangle.$$
(2.6)

Sendo que a dimensão das matrizes  $\alpha$  e  $\beta$  é 4, a solução da equação (2.6) deve ser da forma

$$\langle \vec{r} | \psi(\vec{r}, t) \rangle = \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \\ \psi_3(\vec{r}) \\ \psi_4(\vec{r}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{bmatrix}, \qquad (2.7)$$

conhecido como spinor de Lorentz. Inserindo este spinor em (2.6), encontramos o seguinte sistema matricial a ser resolvido

$$\begin{bmatrix} m_0 c^2 + q \phi(\vec{r}) - E & c \vec{\sigma} \cdot \left( \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \\ c \vec{\sigma} \cdot \left( \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) & -m_0 c^2 + q \phi(\vec{r}) - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$
 (2.8)

Seguindo como principal referência,<sup>27</sup> encontraremos um Hamiltoniano efetivo para a maior componente do spinor de Lorentz. Utilizando a segunda linha da equação matricial (2.8) obtemos

$$\psi_{-}(\vec{r}) = \frac{c\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)}{E + m_{0}c^{2} - q\phi(\vec{r})}\psi_{+}(\vec{r}) .$$
(2.9)

Sabendo que para baixas velocidades  $v \ll c$  e  $E \sim m_0 c^2$ , podemos simplificar a equa-

ção (2.9)

$$\left|\frac{\psi_{-}(\vec{r})}{\psi_{+}(\vec{r})}\right| \sim \frac{v}{c} \ll 1 .$$
(2.10)

Ou seja, a componente  $\psi_+$  possui uma maior contribuição na função de onda total e por esse motivo iremos obter uma equação efetiva para ela. Para isso, inserimos (2.9) na primeira equação de (2.8), obtendo assim

$$\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right) \frac{c^2}{E + m_0 c^2 - q\phi(\vec{r})} \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right) \psi_+(\vec{r}) + q\phi(\vec{r})\psi_+(\vec{r}) = \left(E - m_0 c^2\right)\psi_+(\vec{r}) .$$
(2.11)

Esta será a equação de onde todos os termos de correção do Hamiltoniano da Mecânica Quântica de Schrödinger surgirão "espontaneamente". Identificando a energia da equação de Schrödinger como sendo  $E_s = E - m_0 c^2$  e realizando a expansão do denominador para baixas energias, i.e.  $\mathcal{O}(v^2/c^2)$ , obtemos

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2m_0} \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}\right) \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}\right) + q \phi(\vec{r}) \\ -\frac{1}{4m_0^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}\right) [E_s - q \phi(\vec{r})] \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}\right) \end{bmatrix} \psi_+(\vec{r}) = E_s \psi_+(\vec{r}) . \quad (2.12)$$

É importante destacar algumas sutilezas que essa equação apresenta. A primeira delas é que esta não é uma equação de autovalores, uma vez que a energia  $E_s$  esta contida em ambos os lados da equação. A segunda está ligada ao fato de que quando escrevemos a equação (2.11), nós eliminamos a componente  $\psi_{-}(\vec{r})$ . Sabendo que a relação da densidade de probabilidade, dada pela equação (2.13) deve ser mantida, torna-se necessário renormalizar a função  $\psi_{+}(\vec{r})$ 

$$\int d^3 r \psi^{\dagger}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \int d^3 r \left( \psi_+^{\dagger} \psi_+ + \psi_-^{\dagger} \psi_- \right) = 1 .$$
 (2.13)

Como fizemos a aproximação até  $\mathcal{O}(v^2/c^2)$ , realmente devemos renormalizar a função de onda  $\psi_+(\vec{r})$ , uma vez que segundo a equação (2.10) temos  $|\psi_-(\vec{r})|^2 \sim \frac{v^2}{c^2} |\psi_+(\vec{r})|^2$ . Ou seja,
a parte do spinor  $\psi_{-}(\vec{r})$  tem uma influência que deve ser considerada. Caso fizéssemos a aproximação até  $\mathcal{O}(v/c)$ , esta renormalização seria desprezível, uma vez que a componente de correção é  $\mathcal{O}(v^2/c^2)$ .

Utilizando a equação (2.9), a aproximação  $E \sim m_0 c^2 \gg -q \phi(\vec{r})$  e desprezando termos maior que  $\mathcal{O}(v^2/c^2)$  encontramos

$$\int d^3 r \tilde{\psi}_+^\dagger \tilde{\psi}_+ \simeq 1 , \qquad (2.14)$$

onde

$$\tilde{\psi}_{+}(\vec{r}) = \left[1 + \frac{\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^{2} - \frac{q\hbar}{c}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}}{8m_{0}^{2}c^{2}}\right]\psi_{+}(\vec{r}), \qquad (2.15)$$

é a componente do spinor renormalizada.

Reescrevendo (2.11) em função da componente do spinor renormalizada (2.15) obtemos

$$\begin{bmatrix} \vec{\Pi}^2 \\ 2m_0 - \frac{\vec{\Pi}^4}{8m_0^3 c^2} + q\phi(\vec{r}) - \frac{q\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{\Pi} \times \vec{E}) - \frac{q\hbar}{2m_0 c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \\ - \frac{(q\hbar\vec{B})^2}{8m_0^3 c^2} - \frac{q\hbar}{8m_0^3 c^2} \vec{\Pi}^2 \vec{\sigma} \cdot \vec{B} - \frac{q\hbar^2}{8m_0^2 c^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \end{bmatrix} \tilde{\psi}_+(\vec{r}) = E_s \tilde{\psi}_+(\vec{r}) (2.16)$$

onde

$$\vec{\Pi} \equiv \vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A} , \qquad (2.17)$$

e

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}V(\vec{r}) . \tag{2.18}$$

Nesse ponto vemos o surgimento "espontâneo" dos termos de correção do Hamiltoniano eletrônico, concluindo assim que estes termos aparecem via a aproximação da equação de Dirac para baixas energias.

O primeiro e o segundo termos correspondem a energia cinética e sua correção de mais alta ordem. O terceiro corresponde ao potencial que o elétron está sujeito e o quarto é o acoplamento spin-órbita. O quinto, o sexto e o sétimo representam respectivamente o termo Zeeman e suas correções de mais alta ordem. E finalmente o oitavo é denominado termo de Darwin. Em nossos estudos, consideramos o campo magnético nulo ( $\vec{A} = \vec{0}$ ), excluindo portanto o efeito Zeeman. Desprezamos também a correção de mais alta ordem da energia cinética dos elétrons, resultando em

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + q\phi(\vec{r}) - \frac{q\hbar}{4m_0^2c^2}\vec{\sigma}\cdot(\vec{p}\times\vec{E}) - \frac{q\hbar^2}{8m_0^2c^2}\vec{\nabla}\cdot\vec{E}\right]\tilde{\psi}_+(\vec{r}) = E_s\tilde{\psi}_+(\vec{r}) .$$
(2.19)

Como estamos interessados no acoplamento dos movimentos orbitais junto aos movimentos de spin, excluiremos o termo de Darwin uma vez que este termo é independente do spin e só resultam um pequeno deslocamento nas bandas de energia.

Indentificando  $V(\vec{r}) = q \phi(\vec{r})$  e  $\vec{E} = -\vec{\nabla} \phi(\vec{r})$ , obtemos o Hamiltoniano tratado nesse trabalho dado por

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r}) \times \vec{p} .$$
(2.20)

## 2.2 Método k.p

O objetivo deste trabalho é o estudo dos elétrons em sólidos cristalinos. Temos, portanto como meta, a resolução da equação (2.20), sendo  $V(\vec{r})$  o potencial efetivo sentido pelos elétrons no cristal. Sabendo que esse potencial é devido à densidade eletrônica e aos íons da rede, é fato que há uma periodicidade deste sobre a rede de Bravais do cristal, ou seja,  $V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$ , onde  $\vec{R}$  é o vetor da rede de Bravais.<sup>34</sup> Verificada a periodicidade do potencial  $V(\vec{r})$ , é imediato concluir que o Hamiltoniano (2.20) também é invariante perante uma translação de  $\vec{R}$ , tornando possível assim a utilização do teorema de Bloch.<sup>34</sup> Este nos diz que a função de onda pode ser escrita como

$$\psi_{n,\sigma,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\sigma,\vec{k}}(\vec{r}), \qquad (2.21)$$

onde temos agora a periodicidade incluída nas funções  $u_{n,\sigma,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\sigma,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$ . Como discutido no apêndice A, devido ao teorema de Bloch, só precisamos resolver a nossa equação para a célula unitária. Os índices,  $n, \vec{k} \in \sigma$ , fazem referência respectivamente ao índice de banda, vetor de onda e ao spin. A relação de ortonormalidade para a função de

onda  $\psi_{n,\sigma,\vec{k}}(\vec{r})$ ,

$$\left\langle \psi_{n',\sigma',\vec{k'}} \middle| \psi_{n,\sigma,\vec{k}} \right\rangle = \int_{V} d^{3}r \psi^{*}_{n',\sigma',\vec{k'}} \psi_{n,\sigma,\vec{k}} = \delta_{n,n'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(\vec{k'} - \vec{k}) , \qquad (2.22)$$

sendo V o volume total do sólido, garante que

$$\left\langle u_{n',\sigma',\vec{k}} \right| \left. u_{n,\sigma,\vec{k}} \right\rangle = \int_{V(\Omega)} d^3 r u_{n',\sigma',\vec{k}}^* u_{n,\sigma,\vec{k}} = \delta_{n,n'} \delta_{\sigma,\sigma'} V(\Omega) , \qquad (2.23)$$

onde  $V(\Omega)$  é o volume da célula unitária.

Usando o teorema de Bloch na equação (2.20) obtemos

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r}) \times \vec{\rho} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \left(\vec{\rho} + \frac{\hbar \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V}{4m_0 c^2}\right)\right] u_{n,\sigma,\vec{k}}(\vec{r}) = \tilde{E}_{n,\sigma,\vec{k}} u_{n,\sigma,\vec{k}}(\vec{r})$$
(2.24)

onde  $\tilde{E}_{n,\sigma,\vec{k}} = E_{n,\sigma,\vec{k}} - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0}$ . Dada a equação que as funções  $u_{n,\sigma,\vec{k}}(\vec{r})$  satisfazem, vamos fazer algumas definições afim de compactar nossa notação,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SO} + \mathcal{H}_{kSO} + \mathcal{H}_{k.p}, \qquad (2.25)$$

$$\mathcal{H}_0 \equiv -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + V(\vec{r}) , \qquad (2.26)$$

$$\mathcal{H}_{SO} \equiv \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r}) \times \vec{p} = \vec{\sigma} \cdot \vec{S} , \qquad (2.27)$$

$$\mathcal{H}_{k.p} \equiv \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} , \qquad (2.28)$$

$$\mathcal{H}_{kSO} \equiv \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \vec{k} \cdot \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V = \vec{\sigma} \cdot \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \vec{\nabla} V \times \vec{k} = \vec{\sigma} \cdot \vec{S}_k .$$
(2.29)

Como já justificado no apêndice A, a maioria dos semicondutores II-IV e III-V tem gap direto, sendo assim, resolvemos perturbativamente nosso sistema em torno de  $\vec{k} = \vec{0}$ , o ponto  $\Gamma$ . A equação (2.24) é dada então por

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}V(\vec{r})\times\vec{p}\right]u_{n,\sigma,\vec{0}}(\vec{r}) = E_{n,\sigma,\vec{0}}u_{n,\sigma,\vec{0}}(\vec{r}) .$$
(2.30)

Como já discutido no capítulo anterior, usaremos no cálculo dos elementos de matriz  $\mathcal{H}$  a formulação do grupo simples. Com isso, excluimos o índice  $\sigma$  das funções de Bloch, o que nos resulta como Hamiltoniano não perturbado

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]u_{n,\vec{0}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{0}}u_{n,\vec{0}}(\vec{r}) .$$
(2.31)

Supondo conhecidas as energias  $E_{n,\vec{0}}$  e as autofunções  $u_{n,\vec{0}}(\vec{r})$  dos estados não perturbados, e sabendo que  $u_{n,\vec{0}}(\vec{r})$  forma uma base ortonormal completa, i.e.,  $\sum_{n=1}^{N} u_{n,\vec{0}}^*(\vec{r}) u_{n,\vec{0}}(\vec{r'}) = \delta(\vec{r} - \vec{r'})$ , podemos escrever  $u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{m=1}^{N} a_{n,m}(\vec{k}) u_{m,\vec{0}}(\vec{r})$ . Usando esse resultado em (2.24) obtemos

$$\sum_{m=1}^{N} \left[ E_{m,\vec{0}} - \tilde{E}_{n,\sigma,\vec{k}} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r}) \times \vec{p} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \left( \vec{p} + \frac{\hbar \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V}{4m_0 c^2} \right) \right] a_{n,m}(\vec{k}) u_{m,\vec{0}}(\vec{r}) = 0 .$$
(2.32)

Multiplicando esta por  $u^*_{m'\vec{0}}(\vec{r})$  e integrando sobre a célula unitária, temos

$$\sum_{m=1}^{N} \left\{ \left( E_{m,\vec{0}} - \tilde{E}_{n,\sigma,\vec{k}} \right) \delta_{m',m} + \langle m' | \mathcal{H}_{SO} | m \rangle + \langle m' | \mathcal{H}_{k,p} | m \rangle + \langle m' | \mathcal{H}_{kSO} | m \rangle \right\} a_{n,m}(\vec{k}) = 0 ,$$
(2.33)

onde utilizamos a notação  $\langle r | m \rangle = u_{m,\vec{0}}(\vec{r})$  e  $\langle n | A | m \rangle = \int d^3 r u_{n,\vec{0}}^*(\vec{r}) A u_{m,\vec{0}}(\vec{r})$ , sendo A um operador qualquer.

Lembrando via equação (2.31) que as funções  $u_{n,\vec{0}}(\vec{r})$  não tem dependência com spin, o operador  $\vec{\sigma}$  não operará nestas podendo assim ser retirado da integral, ou seja,

$$\sum_{m=1}^{N} \left\{ \left( E_{m,\vec{0}} - \tilde{E}_{n,\sigma,\vec{k}} \right) \delta_{m',m} + \vec{\sigma} \cdot \langle m' | \vec{S} | m \rangle + \langle m' | \mathcal{H}_{k,p} | m \rangle + \vec{\sigma} \cdot \langle m' | \vec{S}_k | m \rangle \right\} a_{n,m}(\vec{k}) = 0.$$
(2.34)

A equação acima mostra que, fixado um vetor de onda  $\vec{k}$ , temos que resolver uma equação matricial de autovalores de ordem N, onde em princípio temos  $N \rightarrow \infty$ . Como discutido no apêndice A, a base de maior interesse para nosso estudo é a banda de condução de mais baixa energia junto a banda de valência de mais alta energia, representada respectivamente por

$$\{|S\uparrow\rangle, |S\downarrow\rangle, |X\uparrow\rangle, |X\downarrow\rangle, |Y\uparrow\rangle, |Y\downarrow\rangle, |Z\uparrow\rangle, |Z\downarrow\rangle\}$$
(2.35)

Ou seja, estamos interessados no bloco 8 × 8 que corresponde a projeção do nosso Hamiltoniano (2.24) na base (2.35). Em outras palavras, truncamos nosso somatório em (2.34) apenas na base (2.35). No entanto, se apenas diagonalizarmos a equação (2.34), truncada na base citada, de alguma maneira não estaremos considerando a existencia das outras bandas e consequentemente estaremos desprezando suas influências físicas nos resultados obtidos por nós.

Dessa maneira, vemos que esse truncamento gera aproximações. Para o cálculo da massa efetiva do elétron esse truncamento nos garante bons resultados, fato esse que não acontece na determinação da massa efetiva dos buracos pesados, onde obtemos sinais errados para as massas.<sup>35</sup> Esse resultado será visto na Tab. (2.1).

Um Hamiltoniano efetivo que contenha a influência destas outras bandas pode ser obtido através da teoria de perturbação de Löwdin.<sup>36</sup> Posteriormente mostraremos a equi-valência desta com o processo chamado "folding down" encontrado em.<sup>35</sup>

#### 2.3 Teoria de perturbação de Löwdin

Seguindo a referência,<sup>36</sup> derivaremos nessa seção o Hamiltoniano efetivo. Com o propósito de maior simplicidade na notação, escrevemos (2.34) como

$$\sum_{m=1}^{N} \left\{ \mathcal{H}_{mm'} - \tilde{E}_n \delta_{m,m'} \right\} a_{n,m}(\vec{k}) = 0 , \qquad (2.36)$$

onde

$$\tilde{E}_n = \tilde{E}_{n,\sigma,\vec{k}} - E_{n,\vec{0}} , \qquad (2.37)$$

eprecisva colo

$$\mathcal{H}_{mm'} = \vec{\sigma} \cdot \langle m | \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{\nabla} V(\vec{r}) \times \vec{p} | m' \rangle + \langle m | \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} | m' \rangle + \vec{\sigma} \cdot \langle m | \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \vec{\nabla} V \times \vec{k} | m' \rangle \quad (2.38)$$

Separamos agora as funções de Bloch em dois grupos como mostra a equação (2.39). O

primeiro grupo, chamado grupo ou classe A, contém a base de maior interesse. O segundo, o grupo ou classe B, contém as bandas de menor interesse, também chamadas de bandas remotas, devido a estas estarem energeticamente longe das bandas da classe A.

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{m \in A} a_{n,m}(\vec{k}) u_{m,\vec{0}}(\vec{r}) + \sum_{m \in B} a_{n,m}(\vec{k}) u_{m,\vec{0}}(\vec{r}) .$$
(2.39)

Dividimos então o somatório de (2.36) em duas partes e fazendo uma pequena manipulação algébrica chegamos em

$$a_{n,m}(\vec{k}) = \sum_{m' \in A} \frac{\mathcal{H}_{mm'}}{\tilde{E}_n - \mathcal{H}_{mm}} a_{n,m'}(\vec{k}) + \sum_{l \in B} \frac{\mathcal{H}_{ml}}{\tilde{E}_n - \mathcal{H}_{mm}} a_{n,l}(\vec{k}) \qquad \forall m', l \neq m.$$
(2.40)

Feito isso, inserimos  $a_{n,m}(\vec{k})$  no somatório  $\sum_{l\in B}$  de modo a eliminar os estados de B iterativamente, obtendo assim

$$a_{n,m}(\vec{k}) = \sum_{m'\in A} \left[ \frac{H_{mm'}}{\tilde{E}_n - H_{mm}} + \sum_{l\in B} \frac{\mathcal{H}_{ml}}{\tilde{E}_n - \mathcal{H}_{mm}} \frac{\mathcal{H}_{lm'}}{\tilde{E}_n - \mathcal{H}_{ll}} + \sum_{l\in B} \sum_{p\in B} \frac{\mathcal{H}_{ml}}{\tilde{E}_n - \mathcal{H}_{mm}} \frac{\mathcal{H}_{lp}}{\tilde{E}_n - \mathcal{H}_{ll}} \frac{\mathcal{H}_{pm'}}{\tilde{E}_n - \mathcal{H}_{ll}} \frac{\mathcal{H}_{pm'}}{\tilde{E}_n$$

que escrita na forma da equação (2.36), é dada por

$$\sum_{m\in A} \left\{ \mathcal{H}_{mm'}^{ef} - \tilde{E}_n \delta_{m,m'} \right\} a_{n,m}(\vec{k}) = 0 , \qquad (2.42)$$

com

$$\mathcal{H}_{mm'}^{ef} = \mathcal{H}_{mm'} + \sum_{l \in B} \frac{\mathcal{H}_{ml} \mathcal{H}_{lm'}}{\tilde{\mathcal{E}}_n - \mathcal{H}_{ll}} + \sum_{l \in B} \sum_{p \in B} \frac{\mathcal{H}_{ml} \mathcal{H}_{lp} \mathcal{H}_{pm'}}{\left(\tilde{\mathcal{E}}_n - \mathcal{H}_{ll}\right) \left(\tilde{\mathcal{E}}_n - \mathcal{H}_{pp}\right)} + \dots \forall m, m' \neq l, p, l \neq p,$$
(2.43)

sendo o Hamiltoniano efetivo. Hamiltoniano este que leva em consideração a influência das bandas da classe B, chamadas de bandas remotas. Os índices  $n \in m$  fazem referência à classe A e os índices  $l \in p$  à classe B. O resultado do Hamiltoniano efetivo depende de  $\tilde{E}_n$ , uma energia desconhecida a princípio.

## 2.4 Folding down

O Folding down, é um procedimento semelhante ao descrito na subseção passada onde o objetivo é obter um Hamiltoniano efetivo para uma certa classe de funções Primeiramente dividiremos nosso Hamiltoniano em duas partes correspondendo as projeções nas funções de Bloch das Classes A e B. A equação de autovalores correspondente é dada por

$$\begin{bmatrix} \mathcal{H}_{A} & \mathcal{H}_{AB} \\ \mathcal{H}_{BA} & \mathcal{H}_{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}, \qquad (2.44)$$

Realizando um procedimento igual ao realizado na equação de Dirac, eliminamos a parte dependente da classe B. Sendo assim, substituímos

$$b = \frac{1}{E - \mathcal{H}_B} \mathcal{H}_{BA} a , \qquad (2.45)$$

obtida via a segunda linha da equação matricial acima, na equação (2.44) obtendo

$$\mathcal{H}_A^{ef}a = Ea , \qquad (2.46)$$

onde o Hamiltoniano efetivo é dado por

$$\mathcal{H}_{A}^{ef} = \mathcal{H}_{A} + \mathcal{H}_{AB} \frac{1}{E - \mathcal{H}_{B}} \mathcal{H}_{BA} .$$
(2.47)

Supondo que a parte diagonal de  $\mathcal{H}_B$  ( $\mathcal{H}_B^d$ ) seja menor que a parte não diagonal ( $\mathcal{H}_B^{nd}$ ), expandimos  $\frac{1}{(E-\mathcal{H}_B)}$  em série de potências de  $\mathcal{H}_B^{nd}$ , i.e.,

$$\frac{1}{E-\mathcal{H}_B} = \frac{1}{\left(E-\mathcal{H}_B^d\right)-\mathcal{H}_B^{nd}} \simeq \frac{1}{E-\mathcal{H}_B^d} + \frac{1}{E-\mathcal{H}_B^d}\mathcal{H}_B^{nd}\frac{1}{E-\mathcal{H}_B^d} + \cdots$$
(2.48)

Com isso, o Hamiltoniano efetivo dado pela equação (2.47) fica na forma

$$\mathcal{H}_{A}^{ef} = \mathcal{H}_{A} + \mathcal{H}_{AB} \frac{1}{E - \mathcal{H}_{B}^{d}} \mathcal{H}_{BA} + \mathcal{H}_{AB} \frac{1}{E - \mathcal{H}_{B}^{d}} \mathcal{H}_{B}^{nd} \frac{1}{E - \mathcal{H}_{B}^{d}} \mathcal{H}_{BA} + \cdots$$
(2.49)

Obtido o Hamiltoniano efetivo via "folding-down" (2.49), nosso objetivo agora é comparar este com o Hamiltoniano obtido via a teoria de perturbação de Löwdin (2.43).

Lembrando que o elemento  $\mathcal{H}_{nm}$  mapeia a classe A, i.e.,

$$H_A = \begin{pmatrix} \cdot & & \\ & H_{nm} & \\ & & \cdot & \end{pmatrix}, \qquad (2.50)$$

o elemento  $\mathcal{H}_{lp}$  a classe B,

$$H_B = \begin{pmatrix} \ddots & & \\ & H_{lp} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}, \qquad (2.51)$$

e o elemento  $\mathcal{H}_{\mathit{nl}}$  o acoplamento entre as classes A e B, i.e.,

$$H_{AB} = \begin{pmatrix} \ddots & & \\ & H_{nl} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}, \qquad (2.52)$$

identificamos

$$\mathcal{H}_{nm} \to \mathcal{H}_A,$$
 (2.53)

$$\sum_{l\in B} \frac{\mathcal{H}_{nl}\mathcal{H}_{lm}}{E-\mathcal{H}_{ll}} \to \mathcal{H}_{AB} \frac{1}{E-\mathcal{H}_B^d} \mathcal{H}_{BA}, \qquad (2.54)$$

$$\sum_{l\in B}\sum_{p\in B}\frac{\mathcal{H}_{nl}\mathcal{H}_{lp}\mathcal{H}_{pm}}{\left(\tilde{E}_{n}-\mathcal{H}_{ll}\right)\left(\tilde{E}_{n}-\mathcal{H}_{pp}\right)}\to\mathcal{H}_{AB}\frac{1}{E-\mathcal{H}_{B}^{d}}\mathcal{H}_{B}^{nd}\frac{1}{E-\mathcal{H}_{B}^{d}}\mathcal{H}_{BA}.$$
(2.55)

Com isso, quando comparamos as equações (2.43) e (2.49), vemos que as duas são idênticas, ou seja, ambas as equações, obtidas a partir de métodos aparentemente diferentes, nos dão o mesmo resultado para o Hamiltoniano efetivo.

## 2.5 Abordagem por Winkler e Pikus

Além dos dois métodos perturbativos discutidos na seção 3.2 e 3.3 que incluem a influência de bandas remotas, existe ainda um outro, abordado nas rerefências.<sup>37,38</sup> Neste, o resultado para o Hamiltoniano efetivo é exatamente o mesmo que as equações (2.49) e (2.43), mostrando a concordância das três abordagens.

Tal método é derivado e discutido em detalhes em ambas as referências<sup>37,38</sup> e nas seções 3.2 e 3.3, não nos preocuparemos em derivar as equações novamente. O objetivo dessa seção então passa a ser apenas o de entender como o resultado obtido em<sup>37,38</sup> se relaciona com as equações (2.49) e (2.43).

Primeiramente projetamos um Hamiltoniano genérico em todos as autofunções da base (classe A e B), obtendo um Hamiltoniano completo  $\mathcal{H}$  de ordem  $N \times N$ , dado pela Eq. (2.44). Posteriormente, aplicamos uma transformação unitária  $U = e^{-S}$  em nosso Hamiltoniano, de modo que essa bloco diagonaliza o Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  nos subespaços correspondentes às classes A e B, i.e.  $U\mathcal{H}_{AB}U^{\dagger} = 0$ , e consequentemente

$$\begin{pmatrix} \mathcal{H}_{A} & \mathcal{H}_{AB} \\ \mathcal{H}_{BA} & \ddots \end{pmatrix} \xrightarrow{U} \begin{pmatrix} \tilde{\mathcal{H}}_{A} & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix}$$
(2.56)

Com isso, concluímos que tal transformação inclui a interação das classes A e B (representada pela parte do Hamiltoniano que acopla as classes A e B), via adição de novos termos na parte bloco diagonal do Hamiltoniano, exatamente como acontece nos casos discutidos por nós.

e

### 2.6 Hamiltoniano de Luttinger 6x6

O Hamiltoniano de Kane dado pela equação (A.26) considera apenas o primeiro termo do lado direito da equação (2.43), obtida via teoria de pertubação de Löwdin ou métodos equivalentes. Ou seja, este não considera a influência das bandas remotas (classe B). Como mencionado anteriormente, não são em todas as situações estudadas que o Hamiltoniano de Kane se mostra suficiente para a descrição física do problema, tornando-se assim necessária a inclusão da contribuição devido aos termos de mais alta ordem.

Sendo assim, introduzimos o Hamiltoniano de Luttinger<sup>38</sup> afim de aprimorarmos o Hamiltoniano de Kane. Este Hamiltoniano é de ordem 6 e é definido como

$$\mathcal{H}_{nm}^{L} = \langle n | \frac{\hbar}{m_{0}} \vec{k} \cdot \vec{p} | m \rangle + \langle n | \frac{\hbar}{4m_{0}^{2}c^{2}} \left( \vec{\nabla} V(\vec{r}) \times \vec{p} \right) \cdot \vec{\sigma} | m \rangle + \sum_{l \in B} \frac{\langle n | \frac{\hbar}{m_{0}} \vec{k} \cdot \vec{p} | l \rangle \langle l | \frac{\hbar}{m_{0}} \vec{k} \cdot \vec{p} | m \rangle}{E_{v} - H_{ll}} + \langle n | \mathcal{H}_{0} + \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m_{0}} | m \rangle, \qquad (2.57)$$

onde  $|n, m\rangle$  é a base descrita em (2.35) excluindo as bandas de condução. A contribuição do Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{kSO}$  (Hamiltoniano devido ao momento do cristal) não é levada em conta, uma vez que esta corresponde a somente 1% da contribuição do Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{k.p.}^{39}$ 

Para construir então o Hamiltoniano de Luttinger, basta calcularmos o terceiro termo em (2.57) (os dois primeiros e os dois ultimos termos já foram encontrados nos apêndice A e E). Sendo assim, é necessário calcular para os autoestados  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$ ,  $|Z\rangle$  o primeiro termo de correção devido a parte  $\frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{p}}{m_0}$ , obtendo

$$\mathcal{H}^{DKK} = \begin{pmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Nk_y k_x & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_y k_z \\ Nk_z k_x & Nk_z k_y & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix} .$$
(2.58)

Aqui, o termo  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$  já foi adicionado na diagonal do Hamiltoniano  $\mathcal{H}^{DKK}$ . O Hamiltoniano  $\mathcal{H}^{DKK}$  foi inicialmente derivado por Luttinger e Kohn<sup>40</sup> e Dresselhaus, Kip e Kittel<sup>41</sup> para a estrutura de diamante. Estrutura essa que possui as mesmas simetrias ( $S_4, \sigma, ...$ ) da

estrutura cristalina zincblend somadas à simetria de inversão.

Nesse Hamiltoniano, as constantes são definidas por

$$L = \frac{\hbar^2}{2m_0} + F + 2G , \qquad (2.59)$$

$$M = \frac{\hbar^2}{2m_0} + H_1 + H_2 , \qquad (2.60)$$

$$N = F - G + H_1 - H_2 , \qquad (2.61)$$

sendo

$$F = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{j}^{\Gamma_1} \frac{|\langle X | p_x | u_j \rangle|^2}{E_v - E_j} , \qquad (2.62)$$

$$G = \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{j}^{\Gamma_3} \frac{|\langle X | p_x | u_j \rangle|^2}{E_v - E_j} , \qquad (2.63)$$

$$H_{1} = \frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{j}^{\Gamma_{5}} \frac{\left| \langle X | p_{y} | u_{j} \rangle \right|^{2}}{E_{v} - E_{j}} , \qquad (2.64)$$

$$H_{2} = \frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{j}^{\Gamma_{4}} \frac{\left| \langle X | p_{y} | u_{j} \rangle \right|^{2}}{E_{v} - E_{j}} , \qquad (2.65)$$

onde  $|u_j\rangle$  são os estados de base da representação irredutível  $\Gamma_j$ . Esses coeficientes são relacionados aos chamados parâmetros de Luttinger via as equações

$$\gamma_1^L = -\frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{1}{3} \left( L + 2M \right) = -1 - \frac{2}{3} \frac{m_0}{\hbar^2} \left( F + 2G + 2H_1 + 2H_2 \right) , \qquad (2.66)$$

$$\gamma_2^L = -\frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{1}{6} \left( L - M \right) = -\frac{1}{3} \frac{m_0}{\hbar^2} \left( F + 2G - H_1 - H_2 \right) , \qquad (2.67)$$

$$\gamma_3^L = -\frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{1}{6} (N) = -\frac{1}{3} \frac{m_0}{\hbar^2} \left( F - G - H_1 + H_2 \right) .$$
 (2.68)

Uma vez que estamos trabalhando com a formulação do grupo simples, estamos considerando a divisão de nosso Hamiltoniano como (A.4), i.e., nossas funções não dependem de spin. A dependência deste é colocado na mão como vimos em (A.21). Dessa maneira, o Hamiltoniano  $\mathcal{H}^{DKK}$  é degenerado em spin, i.e.,



Figura 2.1 – Representação esquemática da energia das bandas e as respectivas simetrias dos autoestados. Nota-se que não representamos aqui todas as bandas envolvidas.

Com isso, conseguimos facilmente reescrever o Hamiltoniano de Luttinger na base do momento angular total (excluindo as bandas  $|iS\uparrow\rangle$  e  $|iS\downarrow\rangle$ )) mostrado na Tab.(A.3), correspondente a recombinação da base primordial (A.21) como mostrado no apêndice B. Essa base se torna de uso útil uma vez que o Hamiltoniano spin-órbita se torna diagonal nesta.

Na base de momento angular total temos então

$$\mathcal{H}^{L} = \begin{pmatrix} U^{L} + V^{L} & -\bar{S}_{-}^{L} & R^{L} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{-}^{L} & -\sqrt{2}R^{L} \\ -\bar{S}_{-}^{L\dagger} & U^{L} - V^{L} & 0 & R^{L} & \sqrt{2}V^{L} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{-}^{L} \\ R^{L\dagger} & 0 & U^{L} - V^{L} & \bar{S}_{+}^{L\dagger} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{+}^{L} & -\sqrt{2}V^{L} \\ 0 & R^{L\dagger} & \bar{S}_{+}^{L} & U^{L} + V^{L} & \sqrt{2}R^{L\dagger} & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{+}^{L} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{-}^{L\dagger} & \sqrt{2}V^{L} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{+}^{L\dagger} & \sqrt{2}R^{L} & U^{L} - \Delta & 0 \\ -\sqrt{2}R^{L\dagger} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{-}^{L\dagger} & -\sqrt{2}V^{L} & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{+}^{L\dagger} & 0 & U^{L} - \Delta \end{pmatrix}, \quad (2.70)$$

onde, seguem as seguintes definições

$$U^{L} = E_{\nu} - \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}\gamma_{1}^{L}k^{2} , \qquad (2.71)$$

$$V^{L} = -\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}} (\gamma_{2}^{L} k_{\parallel}^{2} - 2k_{z} \gamma_{2}^{L} k_{z}) , \qquad (2.72)$$

$$R^{L} = -\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}\sqrt{3}(\mu^{L}k_{+}^{2} - \bar{\gamma^{L}}k_{-}^{2}), \qquad (2.73)$$

$$\bar{S}_{\pm}^{L} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} 2\sqrt{3}k_{\pm}\gamma_3^L k_z , \qquad (2.74)$$

$$\bar{\gamma}^{L} = (\gamma_{3}^{L} + \gamma_{2}^{L})/2$$
, (2.75)

$$\mu^{L} = (\gamma_{3}^{L} - \gamma_{2}^{L})/2 , \qquad (2.76)$$

definições estas baseados no artigo.42

# 2.7 Hamiltoniano de Kane estendido 8x8 e renormalização dos parametros de Luttinger

A base do Hamiltoniano de Luttinger (2.70) não leva em conta a banda de condução  $(|iS\uparrow\rangle e |iS\downarrow\rangle)$  como pertencente a classe A de interesse. Portanto, quando diagonalizamos este, os resultados não nos dão nenhuma informação sobre as funções de onda e energia dos eletróns. No entanto, como estamos interessados nos Hamiltonianos que descrevem as propriedades dos elétrons, torna-se necessário a inclusão da banda de condução como pertencente a classe A. Sendo assim, devemos tratar agora a base  $|m\rangle$  de (2.57) como

sendo a base completa do momento angular total Tab. (A.3), i.e.,  $|AM_i\rangle$ , i = 1, ..8. Em outras palavras, o Hamiltoniano aumenta sua ordem, sendo agora 8x8, devido à inclusão da banda de condução de mais baixa energia (duplamente degenerada em spin),

$$\mathcal{H}_{|AM\rangle}^{8\times8} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{cc}^{2\times2} & \mathcal{H}_{cv}^{2\times6} \\ (\mathcal{H}_{cv}^{2\times6})^{\dagger} & \mathcal{H}_{vv}^{6\times6} \end{pmatrix} .$$
(2.77)

Os parâmetros L, M, N em (2.58) foram calculados levando-se em consideração a contribuição da banda de condução como banda remota, i.e., pertencente à classe B. Como o Hamiltoniano (2.77) considera esta banda explicitamente na sua base, i.e., pertencente à classe A, devemos redefinir os parâmetros N, L, M de modo a retirar a contribuição provinda desta banda, representada por  $\Gamma_1^c$ . Sendo assim, como ponto de partida devemos trabalhar com um novo Hamiltoniano dado por

$$\tilde{\mathcal{H}}^{DKK} = \begin{pmatrix} Ak^{2} & ik_{x}P & ik_{y}P & ik_{z}P \\ -ik_{x}P & \tilde{L}k_{x}^{2} + \tilde{M}(k_{y}^{2} + k_{z}^{2}) & \tilde{N}k_{x}k_{y} & \tilde{N}k_{x}k_{z} \\ -ik_{y}P & \tilde{N}k_{y}k_{x} & \tilde{L}k_{y}^{2} + \tilde{M}(k_{x}^{2} + k_{z}^{2}) & \tilde{N}k_{y}k_{z} \\ -ik_{z}P & \tilde{N}k_{z}k_{x} & \tilde{N}k_{z}k_{y} & \tilde{L}k_{z}^{2} + \tilde{M}(k_{x}^{2} + k_{y}^{2}) \end{pmatrix},$$
(2.78)

agora 4 × 4, na base  $|S\rangle$ ,  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$ ,  $|Z\rangle$ .

A primeira linha e a primeira coluna foram obtidas no apêndice A e E (com excessão do termo  $Ak^2$  que será determinado posteriormente na seção 3.1) onde só foi levado em conta o acoplamento da banda  $|S\rangle$  com as bandas  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$ ,  $|Z\rangle$ , via o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{k.p}$ dado por  $\langle S | \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} | X_i \rangle$ . Como veremos no capítulo 5., se incluirmos o acoplamento da banda de condução com as bandas remotas, representado pelo termo

$$\sum_{l\in B} \frac{\langle S|\frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\cdot\vec{p}|l\rangle\langle l|\frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\cdot\vec{p}|X_i\rangle}{\left(\frac{E_c+E_v}{2}-H_{ll}\right)},$$
(2.79)

novos termos serão gerados. Esses dão origem ao chamado Hamiltoniano de Dresselhaus ou "bulk inversion asymmetry (BIA) Hamiltonian".<sup>38,43</sup>

Para encontrarmos a relação dos antigos paramêtros N, M, L com os novos  $\tilde{N}, \tilde{M}, \tilde{L}$ ,

basta procurarmos os somatórios aonde a soma perante  $\Gamma_1$  está contida. Dessa maneira, apenas parâmetro F sofre uma alteração em seu valor.

Separando agora a parte do somatório devido a a contribuição da banda  $\Gamma_1^c$ , obtemos

$$F = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{j \neq \Gamma_1^c} \frac{|\langle X | p_x | u_j \rangle|^2}{E_v - E_j} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \frac{|\langle S | p_x | x \rangle|^2}{E_v - E_c} .$$
(2.80)

Identificando

$$E_P = \frac{2m_0P^2}{\hbar^2}$$
  $e$   $E_g = E_c - E_v$  , (2.81)

consequimos escrever

$$\tilde{F} = F + \frac{P^2}{E_G} \,. \tag{2.82}$$

Com esse resultado, é possível encontrar a relação entre os parâmetros do Hamiltoniano DKK de ambos modelos, (2.58) e (2.78),

$$\tilde{L} = L + \frac{P^2}{E_g} , \qquad (2.83)$$

$$\tilde{M} = M \qquad (2.84)$$

$$\tilde{\mathcal{M}} = \mathcal{M} , \qquad (2.84)$$

$$\tilde{N} = N$$
 , (2.85)

consequentemente nos dando a relação entre os parâmetros de Luttinger,

$$\gamma_1 = \gamma_1^L - \frac{E_P}{3E_q} , \qquad (2.86)$$

$$\gamma_2 = \gamma_2^L - \frac{E_P}{6E_q} , \qquad (2.87)$$

$$\gamma_3 = \gamma_3^L - \frac{E_P}{6E_g} \ . \tag{2.88}$$

Redefinidos os parâmetros do Hamiltoniano de Luttinger via consideração da banda  $\Gamma_1^{\it c}$  pertencente a classe A, conseguimos escrever  ${\cal H}^{8\times 8}_{|{\cal A}{\cal M}\rangle}$  , onde

$$\mathcal{H}_{\nu\nu}^{6\times6} = \left( \begin{array}{cccccc} U + V & -\bar{S}_{-} & R & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{-} & -\sqrt{2}R \\ -\bar{S}_{-}^{\dagger} & U - V & 0 & R & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{-} \\ R^{\dagger} & 0 & U - V & \bar{S}_{+}^{\dagger} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{+} & -\sqrt{2}V \\ 0 & R^{\dagger} & \bar{S}_{+} & U + V & \sqrt{2}R^{\dagger} & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{+} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{-}^{\dagger} & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{+}^{\dagger} & \sqrt{2}R & U - \Delta & 0 \\ -\sqrt{2}R^{\dagger} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{-}^{\dagger} & -\sqrt{2}V & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{+}^{\dagger} & 0 & U - \Delta \end{array} \right)$$

$$\mathcal{H}_{cv}^{2\times6} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_{+} & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_{z} & \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_{-} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{z} & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{-} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_{+} & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_{z} & \frac{1}{\sqrt{2}}k_{-}P & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{+} & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{z} \end{pmatrix},$$
(2.90)

e

$$\mathcal{H}_{cc}^{2\times 2} = \left[E_c + Ak^2\right] \mathbf{1}_{2\times 2} , \qquad (2.91)$$

com

$$A = \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{j}^{\Gamma_5} \frac{\left| \langle s | p_x | u_j \rangle \right|^2}{E_c - E_j} \,. \tag{2.92}$$

O Hamiltoniano completo é dado por

$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{-}$	$rac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$	$-\sqrt{2}R$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{-}$	$-\sqrt{2}V$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{+}$	0	$U - \Delta$	
$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{-}$	$\sqrt{2}V$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{+}$	$\sqrt{2}R^{\dagger}$	$U - \Delta$	0	
0	$\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_{-}$	0	R	$\tilde{S}^{\dagger}_{+}$	U + V	$\sqrt{2}R$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{S}^{\dagger}_{+}$	
$\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_{-}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	R	0	U - V	$\dot{S}_{+}$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}^{\dagger}_{+}$	$-\sqrt{2}V$	
$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$-rac{1}{\sqrt{6}}Pk_+$		U - V	0	$R^{\dagger}$	$\sqrt{2}V$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{-}^{\dagger}$	
$-\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+$	0	U + V	$-\bar{S}_{-}^{\dagger}$	$R^{\dagger}$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{S}_{-}^{t}$	$-\sqrt{2}R^{\dagger}$	
0	$E_c + \frac{\hbar^2}{2m_0}(2F + 1)k^2$	0	$-rac{1}{\sqrt{6}}Pk_{-}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+$	$-rac{1}{\sqrt{3}}Pk_{-}$	$rac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$	
$E_c + \frac{\hbar^2}{2m_0}(2F + 1)k^2$	0	$-rac{1}{\sqrt{2}}Pk_{-}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+$	
$\mathcal{H}^{B \times 8}_{ AM\rangle} =$								

2.7 Hamiltoniano de Kane estendido 8x8 e renormalização dos parametros de Luttinger51

(2.93)

•

# 2.8 Diagonalização da matriz $\mathcal{H}^{8\times 8}_{|AM\rangle}$ e obtenção das estruturas de bandas

Utilizando o pacote LAPACK ou o Software Mathematica, diagonalizamos o Hamiltoniano  $\mathcal{H}^{8\times8}_{|AM\rangle}$  para diversos materiais em bulk. Para isso, utilizamos os parâmetros de,<sup>21,42</sup> obtendo assim as respectivias estruturas de bandas dadas pelas Fig. (2.3) e (2.2).

Nas figuras abaixo utilizamos as letras *E*, *HH*, *LH* e *SO* para indexar diferentes energias. A curva representada por *E* em k = 0 é igual à energia das bandas  $|AM_{1,2}\rangle$ . Ela recebe essa letra pois para a maioria dos materiais o perfil dessa energia é do tipo "eletron-like" (concavidade positiva). As curvas representada por *HH* e *LH* em k = 0 são respectivamente iguais às energia das bandas  $|AM_{3,6}\rangle \in |AM_{4,5}\rangle$ . Essas recebem a ultima letra como sendo *H* pois para a maioria dos materiais o perfil dessas energias são do tipo "hole-like" (concavidade negativa). Quando calculamos a massa efetiva para as curvas *HH* e *LH*, vemos que *HH* possui uma massa efetiva maior que *LH*, o que nos motiva a escolher a primeira letra fazendo referência à "heavy" e "light". Já a curva representada por *SO* em k = 0 é igual a energia das bandas  $|AM_{7,8}\rangle$ , energia essa que contém o split devido ao Hamiltoniano spin-órbita, o que por sua vez justifica o uso de *SO*.

Tabe	la 2.1	_	Tabela	contendo	as massas	obtidas	via n	nodelo	de	Kane	junto	com	obtidas	experi	iment	alme	nte
------	--------	---	--------	----------	-----------	---------	-------	--------	----	------	-------	-----	---------	--------	-------	------	-----

Material		$m_e/m_0$	$m_{hh}/m_0$	$m_{lh}/m_0$	$m_{so}/m_0$
GaAs	Exp.	0.0670	-0.3496	-0.0901	-0.1719
	Kane	0.0532	1.0000	-0.1880	-0.2403
InSb	Exp.	0.0135	-0.2631	-0.0152	-0.1100
	Kane	0.0134	1.0000	-0.0312	-0.1555

Afim de compararmos o cálculo das 4 massas efetivas,

$$\frac{1}{m_i^{\star}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E_i}{dk^2},$$
(2.94)

via modelo de Kane (linha tracejada) com os dados experimentais, montamos a Tab. (2.1). Nela, podemos ver que para ambos materiais, encontramos para massa efetiva do elétron



Figura 2.2 – Gráfico das estruturas de Bandas dos materiais (a) GaAs. (b) InSb. A linha tracejada faz referência à diagonalização da matriz (A.26) enquanto a linha contínua faz referência à diagonalização da matriz (2.93).

um valor próximo do experimental. No entanto, isso não acontece para nenhum dos buracos (*LH*,*HH* e *SO*). Principalmente para o buraco pesado (*HH*) o qual o modelo de Kane nem ao menos corrige.

Quando comparamos a estrutura de banda do material *HgTe* com o *CdTe*, vemos que as bandas correspondente à *E* e *LH* inverterem suas posições e também suas concavidades. Dessa maneira, quando construímos o poço quântico *HgTe/CdTe*, obtemos um fechamento de "gap" na interface entre estes materiais, caracterizando assim o comportamento de um metal. No entanto, isso não acontece para o resto da heteroestrutura onde continuamos observando um "gap" como em semicondutores usuais.

Dessa maneira dizemos que o poço quântico *HgTe/CdTe* se comporta ao mesmo tempo como metal (na interface) e isolante, caracterizando assim os isolantes topológicos. O estudo da estrutura HgTe/CdTe é importante atualmente na descrição destes materiais<sup>19,44</sup> onde a denominada fase topologica já foi comprovada experimentalmente para estes



Figura 2.3 – Gráfico das estruturas de Bandas dos materiais (a) HgTe. (b) CdTe. A linha tracejada faz referência à diagonalização da matriz (A.26) enquanto a linha contínua faz referência à diagonalização da matriz (2.93).

poços, na ausência de campo magnético.45

# CAPÍTULO 3

# APROXIMAÇÃO DA FUNÇÃO ENVELOPE (EFA) E O HAMILTONIANO PARA UMA HETEROESTRUTURA

No Cap. 2 deduzimos o Hamiltoniano que descreve o comportamento dos elétrons de condução em *bulk*. Nesta dissertação no entanto, estamos interessados nas heteroestruturas semicondutoras em especial nos poços quânticos. Nestes, devido a restrições espaciais, veja a Fig. (3.1), o movimento dos portadores de carga fica confinado a duas dimensões. Tal confinamento se deve aos diferentes *offsets* Fig. (3.2) das estruturas de banda dos materiais que formam a heteroestrutura. A principal diferença entre esses materiais e bulk é a quebra de simetria de translação, Fig. (3.1), o que torna necessária a dedução do Hamiltoniano eletrônico de uma maneira distinta da obtida no capítulo anterior. Nas próximas seções discutiremos a aproximação da função envelope (EFA, do inglês *Envelope Function Approximation*) aplicada a heteroestruturas.

# 3.1 Aproximação da função envelope (EFA)

Utilizaremos aqui o formalismo da função envelope segundo Burt.<sup>46–49</sup> focando apenas nas suas considerações e hipóteses e no resultado final (a dedução das equações pode ser

encontrada, por exemplo em<sup>50,51</sup>).

A Fig. (3.2) ilustra a interface entre diferentes tipos de materiais  $A \in B$  mostrando a diferença abrupta quanto a estrutura de bandas. É importante frisar aqui, que o eixo de crescimento da nossa heteroestrutura é orientado paralelamente ao eixo  $\hat{z}$ ,veja Fig. A.1.



Figura 3.1 – Arranjo das células de zincblendeee de um poço crescido na direção cristalográfica [001].



Figura 3.2 – Representação esquemática dos offsets das bandas de condução e valência para os poços simples do tipo I.

#### 3.1.1 Considerações e hipóteses sobre a EFA

A primeira consideração é sobre a descrição das funções de onda eletrônicas. Considerase que estas são escritas como combinações lineares das funções de Bloch de cada material no ponto Γ, ou seja

$$\Psi_{\vec{k}}^{i}(\vec{r}) = \sum_{n} f_{n,\vec{k}}^{i}(\vec{r}) u_{n,\vec{0}}^{i}(\vec{r})$$
(3.1)

onde  $u_{n,\vec{0}}^{i}(\vec{r})$  é solução de  $\frac{p^{2}}{2m_{0}} + V(\vec{r})$  e as funções  $f_{n,\vec{k}}^{i}(\vec{r})$  são as chamadas funções envelope. O índice *i* faz referência ao material *A* ou *B*.

A segunda consideração é sobre as funções  $u_{n,\vec{0}}^{i}(\vec{r})$ . As heteroestruturas usadas em nossos cálculos são todas do tipo zincblende com constantes de rede muito próximas. Assim, tratamos as funções de Bloch  $u_{n,\vec{0}}^{i}(\vec{r})$  como sendo iguais em ambos lados da interface. Dessa maneira, podemos omitir o índice *i* na equação acima. Combinando a segunda consideração e a continuidade da função de onda  $\Psi_{\vec{k}}^{A}(\vec{r_{l}}) = \Psi_{\vec{k}}^{B}(\vec{r_{l}})$ , sendo  $\vec{r_{l}}$  os pontos da interface, obtemos

$$\sum_{n} \left[ f_{n,\vec{k}}^{A}(\vec{r_{l}}) - f_{n,\vec{k}}^{B}(\vec{r_{l}}) \right] u_{n,\vec{0}}(\vec{r_{l}}) = 0 .$$
(3.2)

Lembrando que as funções  $u_{n\vec{0}}^{i}(\vec{r})$  formam uma base, concluímos que

$$f^{A}_{n,\vec{k}}(\vec{r_{l}}) = f^{B}_{n,\vec{k}}(\vec{r_{l}}) , \qquad (3.3)$$

ou seja, as funções envelope são contínuas na interface.

A terceira consideração diz que a variação dos campos externos  $g(\vec{r})$  se dá em uma escala muito maior que a do parâmetro de rede do cristal (~ 5Å), o que nos leva ao resultado<sup>51</sup>

$$\int d^3 \vec{r} g(\vec{r}) h(\vec{r}) \simeq \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3 \vec{r} h(\vec{r}) \int d^3 \vec{r} g(\vec{r}) , \qquad (3.4)$$

onde  $h(\vec{r})$  é uma função que varia na escala do parâmetro de rede.

# 3.1.2 Derivação das equações de massa efetiva e do Hamiltoniano efetivo

Utilizando as considerações acima e seguindo os cálculos mostrados em<sup>46-49</sup> encontramos

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 f_{n,\vec{k}}(\vec{r}) - \frac{i\hbar}{m_0}\sum_m \vec{p}_{nm} \cdot \vec{\nabla} f_{m,\vec{k}}(\vec{r}) + E_n(\vec{r}) f_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E f_{n,\vec{k}}(\vec{r}) , \qquad (3.5)$$

onde  $\vec{p}_{nm} = \int d^3 \vec{r} u_{n,\vec{0}}(\vec{r}) \vec{p} u_{m,\vec{0}}(\vec{r})$ , que correspondem às equações de autovalores das funções envelope  $f_{n,\vec{k}}^i(\vec{r})$  para n = 1, ..., N. Para a obtenção da equação de massa efetiva e do nosso Hamiltoniano, utilizaremos um processo semelhante ao descrito nas subsecções 2.2, 2.3 e 2.4. Primeiramente dividiremos nossas funções envelope em duas classes: A (mais relevante fisicamente) e B (menos relevante).

Sendo as funções envelope pertencentes a classe B ( $f_{l,\vec{k}}, f_{p,\vec{k}}, ...$ ) menos dominantes fisicamente, podemos dizer que estas não variam muito espacialmente. Como consequência, as derivadas destas são próximas a zero, o que nos motiva a excluir o primeiro termo do lado esquerdo da igualdade em (3.5) e excluir o somatório sobre a classe B, ou seja

$$\sum_{A,B} \frac{-i\hbar}{m_0} \vec{p}_{nm} \cdot \vec{\nabla} f_{m,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{m \in A} \frac{-i\hbar}{m_0} \vec{p}_{nm} \cdot \vec{\nabla} f_{m,\vec{k}}(\vec{r}) + \underbrace{\sum_{l \in B} \frac{-i\hbar}{m_0} \vec{p}_{nl} \cdot \vec{\nabla} f_{l,\vec{k}}(\vec{r})}_{l,\vec{k}}$$
(3.6)

Isolando as funções envelope  $f_{l,\vec{k}}, f_{p,\vec{k}}, \dots$  em (3.5) obtemos

$$f_{l,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(E - E_l(\vec{r}))} \sum_{m \in A} \frac{-i\hbar}{m_0} \vec{p}_{lm} \cdot \vec{\nabla} f_{m,\vec{k}}(\vec{r}) , \qquad (3.7)$$

onde aqui também desprezamos as derivadas segunda por serem próximas a zero. Substituindo (3.7) em (3.5) obtemos as equações de massa efetiva para as funções envelope pertencentes a classe A, ou seja  $f_{n,\vec{k}}, f_{m,\vec{k}}, ...$ 

$$-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{m\in A}\vec{\nabla}\cdot\left[\frac{1}{m_{nm}^*}\cdot\vec{\nabla}f_{m,\vec{k}}(\vec{r})\right] - \sum_{m\in A}\frac{i\hbar}{m_0}\vec{p}_{nm}\cdot\vec{\nabla}f_{m,\vec{k}}(\vec{r}) = (E-E_n)f_{n,\vec{k}}(\vec{r}) ,\qquad(3.8)$$

onde

$$\frac{1}{m_{nm}^*} \equiv \frac{\delta_{nm}}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{l \in B} \vec{p}_{nl} \frac{1}{(E - E_l(\vec{r}))} \vec{p}_{lm} .$$
(3.9)

Rearranjando a Eq. (3.8) podemos escrever

$$\left(-\frac{\hbar^{2}\nabla^{2}}{2m_{0}}+E_{n}(\vec{r})\right)f_{n,\vec{k}}(\vec{r})-\sum_{m\in\mathcal{A}}\left[\frac{i\hbar}{m_{0}}\vec{p}_{nm}\cdot\vec{\nabla}+\frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}}\vec{\nabla}\cdot\sum_{l\in\mathcal{B}}\vec{p}_{nl}\frac{1}{(E-E_{l}(\vec{r}))}\vec{p}_{lm}\cdot\vec{\nabla}\right]f_{m,\vec{k}}(\vec{r})=Ef_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$
(3.10)

A equação acima corresponde ao Hamiltoniano efetivo para uma heteroestrutura com confinamento nas três direções espaciais  $E_l(\vec{r})$ . No caso em que estamos interessados, confinamento apenas na direção z, devemos realizar as trocas  $-i\partial_x \rightarrow k_x$ ,  $-i\partial_y \rightarrow k_y$  e  $E_l(\vec{r}) \to E_l(z)$  e tomar  $f_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k} \| \cdot \vec{r}}}{\sqrt{A}} f_n(z)$ , ou seja, elétrons livres no plano xy.

#### 3.1.3 Hamiltoniano para heteroestruturas zincblende

Encontrado a forma genérica para o Hamiltoniano de uma heteroestrutura, vamos ao caso de nosso interesse. Observando a Eq. (3.10), notamos que os três primeiros termos do lado esquerdo da equação já são conhecidos do capítulo anterior. Sendo assim, falta apenas encontrarmos o último termo do lado esquerdo da igualdade, o termo responsável pela contribuição devido às bandas remotas que denominaremos por  $\mathcal{H}_{nm}^{rem}$ ,

$$\mathcal{H}_{nm}^{rem} = -\frac{\hbar^2}{m_0^2} \vec{\nabla} \cdot \sum_{l \in B} \vec{p}_{nl} \frac{1}{(E - E_l(\vec{r}))} \vec{p}_{lm} \cdot \vec{\nabla} .$$
(3.11)

Reescevendo então a Eq. (3.11) utilizando  $\vec{A} \cdot \vec{B} = \sum_{\alpha=x,y,z} A_{\alpha} B_{\alpha}$  juntamente com a notação de Dirac temos

$$\mathcal{H}_{nm}^{rem} = -\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{l \in B} \sum_{\alpha = x, y, z} \sum_{\beta = x, y, z} \partial_\alpha \langle n | p_\alpha | l \rangle \frac{1}{(E - E_l(\vec{r}))} \langle l | p_\beta | m \rangle \partial_\beta .$$
(3.12)

O cálculo procede de maneira equivalente ao da determinação do Hamiltoniano em bulk, bastando fazer a análise sobre os elementos de matriz. A seguir mostramos a dedução de apenas alguns deles.

#### 3.1.3.1 Cálculo do termo $\langle S | \mathcal{H}^{rem} | S \rangle$

Escolhendo n = S e m = S em 3.12 obtemos

$$\mathcal{H}_{ss}^{rem} = -\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{l \in B} \sum_{\alpha = x, y, z} \sum_{\beta = x, y, z} \partial_\alpha \left\langle s \right| p_\alpha \left| l \right\rangle \frac{1}{\left( E - E_l \left( \vec{r} \right) \right)} \left\langle l \right| p_\beta \left| s \right\rangle \partial_\beta.$$
(3.13)

Utilizando a tabela de multiplicação das representações irredutíveis, i.e., Tab. (A.2),

$$\Gamma_{1} \otimes \Gamma_{5} \otimes \Gamma_{1} = \Gamma_{5}$$

$$\Gamma_{1} \otimes \Gamma_{5} \otimes \Gamma_{2} = \Gamma_{4}$$

$$\Gamma_{1} \otimes \Gamma_{5} \otimes \Gamma_{3} = \Gamma_{4} \oplus \Gamma_{5}$$

$$\Gamma_{1} \otimes \Gamma_{5} \otimes \Gamma_{4} = \Gamma_{2} \oplus \Gamma_{3} \oplus \Gamma_{4} \oplus \Gamma_{5}$$

$$\Gamma_{1} \otimes \Gamma_{5} \otimes \Gamma_{5} = \Gamma_{1} \oplus \Gamma_{3} \oplus \Gamma_{4} \oplus \Gamma_{5},$$
(3.14)

e o teorema descrito no apêndice A temos que os únicos elementos de matriz  $\langle S | p_{\alpha} | l \rangle$ não nulos ocorrem quando  $|l\rangle \in \Gamma_5$ . A banda  $\Gamma_5$  aqui refere-se à banda de condução remota com seus estados  $|\Gamma_5^c(i)\rangle$  representados por  $|X'\rangle$ ,  $|Y'\rangle$ ,  $|Z'\rangle$ . A partir dos resultados mostrados no apêndice E sabemos que os únicos elementos não nulos são

$$\langle \Gamma_1 | p_x | \Gamma_5(1) \rangle = \langle \Gamma_1 | p_y | \Gamma_5(2) \rangle = \langle \Gamma_1 | p_z | \Gamma_5(3) \rangle , \qquad (3.15)$$

ou seja, quando  $\alpha = \beta$ , o que nos leva a

$$\mathcal{H}_{ss}^{rem} = -\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i=1}^3 \sum_{\alpha=x,y,z} \left| \langle S | p_\alpha | \Gamma_5^c(i) \rangle \right|^2 \partial_\alpha \frac{1}{\left( E - E_{\Gamma_5^c}(\vec{r}) \right)} \partial_\alpha , \qquad (3.16)$$

que pode ser reescrito como

$$\mathcal{H}_{ss}^{rem} = -\partial_x A' \partial_x - \partial_y A' \partial_y - \partial_z A' \partial_z , \qquad (3.17)$$

com

$$A' \equiv \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i=1}^3 \frac{|\langle S | p_x | \Gamma_5^{\nu}(i) \rangle|^2}{\left(E_c - E_{\Gamma_5^{c}}(\vec{r})\right)} , \qquad (3.18)$$

onde fizemos a aproximação  $E \sim E_c$ .

#### 3.1.3.2 Cálculo do termo $\langle X | \mathcal{H}^{rem} | X \rangle$

Tomando n = X e m = X

$$\mathcal{H}_{xx}^{rem} = -\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{l \in B} \sum_{\alpha = x, y, z} \sum_{\beta = x, y, z} \partial_\alpha \left\langle X \right| p_\alpha \left| l \right\rangle \frac{1}{\left( E - E_l \left( \vec{r} \right) \right)} \left\langle l \right| p_\beta \left| X \right\rangle \partial_\beta, \tag{3.19}$$

utilizando a tabela de multiplicação das representações irredutíveis, i.e., Tab. (A.2),

$$\Gamma_{5} \otimes \Gamma_{5} \otimes \Gamma_{1} = \Gamma_{1} \oplus \Gamma_{3} \oplus \Gamma_{4} \oplus \Gamma_{5}$$

$$\Gamma_{5} \otimes \Gamma_{5} \otimes \Gamma_{2} = \Gamma_{2} \oplus \Gamma_{3} \oplus \Gamma_{4} \oplus \Gamma_{5}$$

$$\Gamma_{5} \otimes \Gamma_{5} \otimes \Gamma_{3} = \Gamma_{1} \oplus \Gamma_{2} \oplus 2\Gamma_{3} \oplus 2\Gamma_{4} \oplus 2\Gamma_{5}$$

$$\Gamma_{5} \otimes \Gamma_{5} \otimes \Gamma_{4} = \Gamma_{1} \oplus \Gamma_{2} \oplus 2\Gamma_{3} \oplus 4\Gamma_{4} \oplus 3\Gamma_{5}$$

$$\Gamma_{5} \otimes \Gamma_{5} \otimes \Gamma_{5} = \Gamma_{1} \oplus \Gamma_{2} \oplus 2\Gamma_{3} \oplus 3\Gamma \oplus 4\Gamma_{5}.$$
(3.20)

e usando o teorema descrito no apêndice A, sabemos que os únicos elementos de matriz  $\langle X_i | p_{\alpha} | l \rangle$  não nulos ocorrem quando  $| l \rangle \in \Gamma_1, \Gamma_3, \Gamma_4, \Gamma_5$ . As bandas  $\Gamma_1$  e  $\Gamma_5$  correspondem, respectivamente, às banda  $\Gamma_1$  de valência e  $\Gamma_5$  de condução, cujos estados são dados por  $|\Gamma_1^v(i)\rangle$  e  $|\Gamma_5^c(i)\rangle$ , representados por  $|S'\rangle$  e  $|X'\rangle$ ,  $|Y'\rangle$ ,  $|Z'\rangle$ , respectivamente.

Como já mencionado, existem 4 bandas que dão contribuições para o elemento de matriz  $\langle X | \mathcal{H}^{rem} | X \rangle$ , ou seja

$$\mathcal{H}_{xx}^{rem} = \mathcal{H}_{xx}^{rem} \left( \Gamma_1^{v} \right) + \mathcal{H}_{xx}^{rem} \left( \Gamma_3 \right) + \mathcal{H}_{xx}^{rem} \left( \Gamma_4 \right) + \mathcal{H}_{xx}^{rem} \left( \Gamma_5^{c} \right) .$$
(3.21)

Sendo assim, iremos calcular as contribuições devido às bandas na seguinte ordem  $|\Gamma_1^{\nu}\rangle$ ,  $|\Gamma_3\rangle$ ,  $|\Gamma_4\rangle$ ,  $|\Gamma_5^{c}\rangle$ Começando por  $\mathcal{H}_{xx}^{rem}$  ( $\Gamma_1^{\nu}$ ) e utilizando a Eq. (3.15) vemos que para esse termo ser não nulo, devemos ter  $\alpha = \beta = x$ , resultando em

$$\mathcal{H}_{xx}^{rem}\left(\Gamma_{1}^{\nu}\right) = -\frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{i} \partial_{x} \left\langle X \right| p_{x} \left| \Gamma_{1}^{\nu}\left(i\right) \right\rangle \frac{1}{\left(E - E_{\Gamma_{1}^{\nu}}\left(\vec{r}\right)\right)} \left\langle \Gamma_{1}^{\nu}\left(i\right) \right| p_{x} \left| X \right\rangle \partial_{x} . \tag{3.22}$$

Fazendo a aproximação  $E \sim E_v$  e definindo

$$F \equiv \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i} \frac{|\langle X | \, p_x \, | \Gamma_1^v(i) \rangle|^2}{\left(E_v - E_{\Gamma_1^v}(\vec{r})\right)} \,, \tag{3.23}$$

obtemos

$$\mathcal{H}_{xx}^{rem}\left(\Gamma_{1}^{v}\right) = -\partial_{x}F\partial_{x} . \tag{3.24}$$

Para o termo  $\mathcal{H}_{xx}^{rem}$  ( $\Gamma_3$ ), teoria de grupos nos dá que os únicos elementos não nulos serão os do tipo

$$\langle X | p_x | \Gamma_3(i) \rangle. \tag{3.25}$$

Usando novamente a aproximação  $E \sim E_v$  e definindo

$$2G \equiv \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{i \in \Gamma_3} \frac{|\langle X | \, p_x \, | \Gamma_3(i) \rangle|^2}{(E_v - E_{\Gamma_3}(\vec{r}))}$$
(3.26)

obtemos

$$\mathcal{H}_{xx}^{rem}\left(\Gamma_{3}\right) = -\partial_{x}2G\partial_{x} \ . \tag{3.27}$$

Para a banda  $\mathcal{H}_{xx}^{rem}$  ( $\Gamma_4$ ), as relações entre os elementos de matriz via teoria de grupos é dada por

$$\langle X | p_y | \Gamma_4 (3) \rangle = \langle Y | p_z | \Gamma_4 (1) \rangle = \langle Z | p_x | \Gamma_4 (2) \rangle = - \langle X | p_z | \Gamma_4 (2) \rangle$$
  
=  $- \langle Y | p_x | \Gamma_4 (3) \rangle = - \langle Z | p_y | \Gamma_4 (1) \rangle.$  (3.28)

Analisando a equação acima, vemos que para o termo  $\mathcal{H}_{xx}^{rem}(\Gamma_4)$  ser diferente de zero devemos ter  $|\Gamma_4(i)\rangle \neq |\Gamma_4(1)\rangle$  e  $\alpha = \beta$  resultando em

$$\mathcal{H}_{xx}^{rem}\left(\Gamma_{4}\right) = -\frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{i\neq 1} \sum_{\alpha\neq x} \partial_{\alpha} \frac{\langle X | p_{\alpha} | \Gamma_{4}\left(i\right) \rangle \langle \Gamma_{4}\left(i\right) | p_{\alpha} | X \rangle}{(E - E_{\Gamma_{4}}\left(\vec{r}\right))} \partial_{\alpha} .$$
(3.29)

Utilizando  $E \sim E_v$  e definindo

$$H_{2} \equiv \frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{i \neq 1} \frac{\left| \langle X | p_{y} | \Gamma_{4}(i) \rangle \right|^{2}}{(E_{v} - E_{\Gamma_{4}}(\vec{r}))} , \qquad (3.30)$$

juntamente com a utilização da Eq. (3.28) obtemos

$$\mathcal{H}_{xx}^{rem}\left(\Gamma_{4}\right) = -\partial_{y}H_{2}\partial_{y} - \partial_{z}H_{2}\partial_{z} . \tag{3.31}$$

Com os resultados acima, falta agora apenas calcularmos a contribuição devido à banda  $\Gamma_5^c$ . Utilizando resultados do apêndice E, os únicos elementos não nulos são  $\langle X_i | p_j | \Gamma_5^c(k) \rangle$ onde  $i \neq j \neq k$ . Dessa maneira,  $\alpha, \beta \neq x$  e  $| \Gamma_5^c(i) \rangle \neq | X' \rangle$ , o que nos leva a

$$\mathcal{H}_{xx}^{rem}\left(\Gamma_{5}^{c}\right) = -\frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{i\neq 1} \sum_{\alpha,\beta\neq X} \partial_{\alpha} \frac{\langle x | p_{\alpha} | \Gamma_{5}^{c}(i) \rangle \langle \Gamma_{5}^{c}(i) | p_{\beta} | X \rangle}{\left(E - E_{\Gamma_{5}^{c}}(\vec{r})\right)} \partial_{\beta} .$$
(3.32)

As relações dos elementos de matriz dadas por teoria de grupos garante que  $\alpha \neq \beta$ ,

resultando em

$$\mathcal{H}_{xx}^{rem}\left(\Gamma_{5}^{c}\right) = -\partial_{y}H_{1}\partial_{y} - \partial_{z}H_{1}\partial_{z} , \qquad (3.33)$$

onde usamos a aproximação  $E \sim E_v$  e definimos

$$H_{1} \equiv \frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{i \neq 1} \frac{\left| \langle X | p_{y} | \Gamma_{5}^{c}(i) \rangle \right|^{2}}{\left( E_{v} - E_{\Gamma_{5}^{c}}(\vec{r}) \right)} .$$
(3.34)

Substituindo as Eqs. (3.24), (3.27), (3.31) e (3.33) em (3.21), obtemos

$$\mathcal{H}_{xx}^{rem} = -\partial_x [F + 2G] \partial_x - \partial_y [H_1 + H_2] \partial_y - \partial_z [H_1 + H_2] \partial_z.$$
(3.35)

#### 3.1.3.3 Cálculo do termo $\langle X | \mathcal{H}^{rem} | Y \rangle$

Escolhendo n = X e m = Y obtemos

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem} = -\frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{l \in B} \sum_{\alpha = x, y, z} \sum_{\beta = x, y, z} \partial_\alpha \left\langle X \right| p_\alpha \left| l \right\rangle \frac{1}{\left( E - E_l\left( \vec{r} \right) \right)} \left\langle l \right| p_\beta \left| Y \right\rangle \partial_\beta.$$
(3.36)

Como já discutido no cálculo do elemento  $\langle X | \mathcal{H}^{rem} | X \rangle$ , sabemos que os únicos elementos de matriz  $\langle X_i | p_{\alpha} | l \rangle$  não nulos ocorrem quando  $| l \rangle \in \Gamma_1, \Gamma_3, \Gamma_4, \Gamma_5$ . Sendo quatro, o número de bandas que dão contribuições para o elemento de matriz  $\langle X | \mathcal{H}^{rem} | Y \rangle$  podemos escrever

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem} = \mathcal{H}_{xy}^{rem} \left( \Gamma_1^v \right) + \mathcal{H}_{xy}^{rem} \left( \Gamma_3 \right) + \mathcal{H}_{xy}^{rem} \left( \Gamma_4 \right) + \mathcal{H}_{xy}^{rem} \left( \Gamma_5^c \right) .$$
(3.37)

Começando então por  $\mathcal{H}_{xy}^{rem}$  ( $\Gamma_1^v$ ), basta utilizarmos a equação (3.15) para vermos que só teremos termos não nulos quando  $\alpha = x$  e  $\beta = y$ . Com isso,

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem}\left(\Gamma_{1}^{\nu}\right) = -\frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{i} \partial_{x} \frac{\langle X | p_{x} | \Gamma_{1}^{\nu}(i) \rangle \langle \Gamma_{1}^{\nu}(i) | p_{y} | Y \rangle}{\left(E - E_{\Gamma_{1}^{\nu}}(\vec{r})\right)} \partial_{y} , \qquad (3.38)$$

que simplicada resulta na expressão

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem}\left(\Gamma_{1}^{v}\right) = -\frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{i} \partial_{x} \frac{\left|\left\langle X\right| p_{x} \left|\Gamma_{1}^{v}\left(i\right)\right\rangle\right|^{2}}{\left(E - E_{\Gamma_{1}^{v}}\left(\vec{r}\right)\right)} \partial_{y}$$
(3.39)

ou ainda

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem}\left(\Gamma_{1}^{v}\right) = -\partial_{x}F\partial_{y} , \qquad (3.40)$$

onde utilizamos a definição de F via a Eq. (3.23).

Para o termo  $\mathcal{H}_{xy}^{rem}(\Gamma_3)$  basta olharmos para a Eq. (3.25) para concluirmos que os únicos termos não nulos se dão quando  $\alpha = x$  e  $\beta = x$ ,

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem}\left(\Gamma_{3}\right) = -\frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{i} \partial_{x} \frac{\langle x | p_{x} | \Gamma_{3}\left(i\right) \rangle \langle \Gamma_{3}\left(i\right) | p_{y} | y \rangle}{(E - E_{\Gamma_{3}}\left(\vec{r}\right))} \partial_{y} .$$
(3.41)

No entanto, para relacionar esse somatório com a definição de G em (3.26) necessitamos do uso da seguinte relação

$$\langle x | p_x | \Gamma_3(1) \rangle = -\langle y | p_y | \Gamma_3(1) \rangle = -\sqrt{3} \langle x | p_x | \Gamma_3(2) \rangle = -\sqrt{3} \langle y | p_y | \Gamma_3(2) \rangle , \quad (3.42)$$

que quando aplicada à Eq. (3.41) permite-nos encontrar

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem}\left(\Gamma_{3}\right)=\partial_{x}G\partial_{y}.\tag{3.43}$$

Para o termo  $\mathcal{H}_{xy}^{rem}$  ( $\Gamma_4$ ) necessitamos do uso da Eq. (3.28), o restringe os somatórios a  $\alpha \neq x$  e  $\beta \neq y$ . Com isso obtemos

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem}\left(\Gamma_{4}\right) = -\frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{i} \sum_{\alpha \neq x, \beta \neq y} \partial_{\alpha} \frac{\langle x | p_{\alpha} | \Gamma_{4}\left(i\right) \rangle \langle \Gamma_{4}\left(i\right) | p_{\beta} | x \rangle}{(E - E_{\Gamma_{4}}\left(\vec{r}\right))} \partial_{\beta} .$$
(3.44)

Abrindo ambos os somatórios em  $\alpha$  e  $\beta$  encontramos quatro possíveis produtos dos elementos de matriz

$$\langle X | p_{y} | \Gamma_{4}(i) \rangle \langle \Gamma_{4}(i) | p_{x} | Y \rangle ; \langle X | p_{z} | \Gamma_{4}(i) \rangle \langle \Gamma_{4}(i) | p_{x} | Y \rangle$$

$$\langle X | p_{y} | \Gamma_{4}(i) \rangle \langle \Gamma_{4}(i) | p_{z} | Y \rangle ; \langle X | p_{z} | \Gamma_{4}(i) \rangle \langle \Gamma_{4}(i) | p_{z} | Y \rangle ,$$

$$(3.45)$$

onde utilizando (3.28) novamente, vemos que apenas o primeiro produto de (3.45) é não nulo, o que nos leva a

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem}\left(\Gamma_{4}\right) = -\frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{i} \partial_{y} \frac{\langle X | p_{y} | \Gamma_{4}\left(i\right) \rangle \langle \Gamma_{4}\left(i\right) | p_{x} | Y \rangle}{(E - E_{\Gamma_{4}}\left(\vec{r}\right))} \partial_{x} .$$
(3.46)

Para relacionar esse somatório com a definição de  $H_2$  utilizamos a relação

$$\langle X | p_y | \Gamma_4(3) \rangle = -\langle Y | p_x | \Gamma_4(3) \rangle , \qquad (3.47)$$

extraída de (3.28). Inserindo (3.47) em (3.46) obtemos

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem}\left(\Gamma_{4}\right) = \partial_{y}H_{2}\partial_{x} . \tag{3.48}$$

Para o termo  $\mathcal{H}_{xy}^{rem}(\Gamma_5^c)$ , os únicos elementos não nulos são  $\langle X_i | p_j | \Gamma_5^c(k) \rangle$  onde  $i \neq j \neq k$ . Dessa maneira,  $\alpha \neq x$  e  $\beta \neq y$  e  $| \Gamma_5^c(i) \rangle \neq | X' \rangle$ ,  $| Y' \rangle$  resultando em

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem}\left(\Gamma_{5}^{c}\right) = -\frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{i} \partial_{y} \frac{\langle X | p_{y} | \Gamma_{5}(i) \rangle \langle \Gamma_{5}(i) | p_{x} | Y \rangle}{\left(E - E_{\Gamma_{5}^{c}}(\vec{r})\right)} \partial_{x} .$$
(3.49)

Lembrando que

$$\langle X | p_y | Z' \rangle = \langle Y | p_x | Z' \rangle , \qquad (3.50)$$

conseguimos escrever a Eq. (3.49) em função da constante  $H_1$  definida em (3.34), que nos leva a

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem}\left(\Gamma_{5}^{c}\right) = -\partial_{y}H_{1}\partial_{x} . \tag{3.51}$$

Substituindo então (3.40), (3.43), (3.48) e (3.51) em (3.37) obtemos

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem} = \partial_x \left( G - F \right) \partial_y + \partial_y \left( H_2 - H_1 \right) \partial_x . \tag{3.52}$$

#### 3.1.4 Determinação da matriz estendida de Kane para heteroestruturas

Utilizando o médoto k.p derivamos a matriz para o cristal em bulk dada pela Eq. (2.77). Para obtermos o Hamiltoniano para heteroestruturas, como já mencionado, temos que utilizar o formalismo da função envelope. A principal diferença entre ambos os Hamiltonianos reside no fato de que o vetor de onda dado por  $\vec{k}$  não é mais um bom número quântico, o que pode gerar termos diferentes aos de bulk como será mostrado na seção a sequir.

Para recalcular então o Hamiltoniano de Luttinger para heteroestruturas, aplicamos a

expressão

$$\mathcal{H}_{nm}^{rem} = -\frac{\hbar^2}{m_0^2} \vec{\nabla} \cdot \sum_{l \in B} \vec{p}_{nl} \frac{1}{(E - E_l(\vec{r}))} \vec{p}_{lm} \cdot \vec{\nabla}$$
(3.53)

e utilizamos os resultados das seções anteriores, encontrando para o novo Hamiltoniano DKK

$$\mathcal{H}_{HETERO}^{DKK} = \begin{pmatrix} k_x L k_x + k_x N_1 k_y + k_y N_2 k_x & k_x N_1 k_z + k_z N_2 k_x \\ k_y M k_y + k_z M k_z & k_y L k_y + k_y N_1 k_z + k_y N_2 k_x \\ k_y N_1 k_x + k_x N_2 k_y & k_x M k_x + k_z M k_z \\ k_z N_1 k_x + k_x N_2 k_z & k_z N_1 k_y + k_y N_2 k_z & k_z L k_z + k_y M k_y \end{pmatrix}$$
(3.54)

onde as constantes são definidas por

$$L = \frac{\hbar^2}{2m_0} + F + 2G , \qquad (3.55)$$

$$M = \frac{\hbar^2}{2m_0} + H_1 + H_2 , \qquad (3.56)$$

$$N_1 = F - G$$
 , (3.57)

$$N_2 = H_1 - H_2 , (3.58)$$

com

$$F = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{j}^{\Gamma_1} \frac{|\langle X | p_x | u_j \rangle|^2}{E_v - E_j(\vec{r})} , \qquad (3.59)$$

$$G = \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{j}^{\Gamma_3} \frac{\left| \langle X | \, p_x \, \left| \, u_j \right\rangle \right|^2}{E_v - E_j(\vec{r})} \,, \tag{3.60}$$

$$H_{1} = \frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{j}^{\Gamma_{5}} \frac{\left| \langle X | p_{y} | u_{j} \rangle \right|^{2}}{E_{v} - E_{j}(\vec{r})}$$
(3.61)

e

$$H_{2} = \frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{j}^{\Gamma_{4}} \frac{\left| \langle X | p_{y} | u_{j} \rangle \right|^{2}}{E_{v} - E_{j}(\vec{r})} .$$
(3.62)

Note que esses coeficientes são os mesmos que os achados no caso em bulk quando feita a correspondência  $E_j \rightarrow E_j(\vec{r})$ . Tais coeficientes são relacionados pelos novos parâmetros de Luttinger, agora construídos para uma heteroestrutura,

$$\gamma_1^L = -\frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{1}{3} \left( L + 2M \right) = -1 - \frac{2}{3} \frac{m_0}{\hbar^2} \left( F + 2G + 2H_1 + 2H_2 \right) , \qquad (3.63)$$

$$\gamma_2^L = -\frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{1}{6} \left( L - M \right) = -\frac{1}{3} \frac{m_0}{\hbar^2} \left( F + 2G - H_1 - H_2 \right) , \qquad (3.64)$$

$$\gamma_3^L = -\frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{1}{6} (N_1 + N_2) = -\frac{1}{3} \frac{m_0}{\hbar^2} (F - G - H_1 + H_2)$$
(3.65)

e

$$\kappa^{L} = -\frac{1}{3} - \frac{m_{0}}{\hbar^{2}} \frac{1}{3} (N_{1} - N_{2}) = -\frac{1}{3} - \frac{1}{3} \frac{m_{0}}{\hbar^{2}} (N_{1} - N_{2}) .$$
(3.66)

Comparando os Hamiltonianos DKK em bulk (2.58) e para heteroestruturas (3.54), vemos que o primeiro só contém três constante L, M e N, enquanto o segundo contém quatro  $L, M, N_1$  e  $N_2$ . Assim, necessitamos de quatro parâmetros de Luttinger ao invés de três como era o caso em bulk. O resultado em bulk é facilmente recuperado bastando tratar as componentes de k não mais como operadores e sim como números, ou seja, só teremos o termo  $N_1 + N_2$  em (3.54), o qual definimos como sendo N e recuperando assim a equação (2.58).

No caso de poços quânticos temos  $\vec{k} = (k_x, k_y, -i\partial_z)$  e  $E(\vec{r}) = E(z)$ . Utilizando agora o mesmo procedimento contido na seção 2.5 para a obtenção da matrix (2.70) obtemos

$$\mathcal{H}_{QW}^{L} = \begin{pmatrix} U^{L} + V^{L} & -\bar{S}_{-}^{L} & R^{L} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{-}^{L} & -\sqrt{2}R^{L} \\ -\bar{S}_{-}^{L\dagger} & U^{L} - V^{L} & C^{L} & R^{L} & \sqrt{2}V^{L} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{-}^{L} \\ R^{L\dagger} & C^{L\dagger} & U^{L} - V^{L} & \bar{S}_{+}^{L\dagger} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{+}^{L} & -\sqrt{2}V^{L} \\ 0 & R^{L\dagger} & \bar{S}_{+}^{L} & U^{L} + V^{L} & \sqrt{2}R^{L\dagger} & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{+}^{L} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{-}^{L\dagger} & \sqrt{2}V^{L} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{+}^{L\dagger} & \sqrt{2}R^{L} & U^{L} - \Delta & C^{L} \\ -\sqrt{2}R^{L\dagger} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{-}^{L\dagger} & -\sqrt{2}V^{L} & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{+}^{L\dagger} & C^{L\dagger} & U^{L} - \Delta \end{pmatrix}, \quad (3.67)$$

onde seguem as seguintes definições

$$U^{L} = E_{\nu}(z) - \frac{\hbar^{2}}{2m_{0}} \left( \gamma_{1}^{L} k_{\parallel}^{2} + k_{z} \gamma_{1}^{L} k_{z} \right), \qquad (3.68)$$

$$V^{L} = -\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}} (\gamma_{2}^{L} k_{\parallel}^{2} - 2k_{z} \gamma_{2}^{L} k_{z}), \qquad (3.69)$$

$$R^{L} = -\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}\sqrt{3}(\mu^{L}k_{+}^{2} - \bar{\gamma}^{L}k_{-}^{2}), \qquad (3.70)$$

$$\bar{S}_{\pm}^{L} = -\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}\sqrt{3}k_{\pm}\left(\left\{\gamma_{3}^{L}, k_{z}\right\} + \left[\kappa^{L}, k_{z}\right]\right), \qquad (3.71)$$

$$\tilde{S}_{\pm}^{L} = -\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}\sqrt{3}k_{\pm}\left(\left\{\gamma_{3}^{L}, k_{z}\right\} - \frac{1}{3}\left[\kappa^{L}, k_{z}\right]\right), \qquad (3.72)$$

$$C^{L} = \frac{\hbar^{2}}{m_{0}} k_{-}[\kappa^{L}, k_{z}], \qquad (3.73)$$

$$\bar{\mathbf{y}}^L = (\mathbf{y}_3^L - \mathbf{y}_2^L)/2,$$
 (3.74)

$$\mu^{L} = (\gamma_{3}^{L} + \gamma_{2}^{L})/2. \tag{3.75}$$

com {x, y} sendo o anticomutador ({x, y} = xy + yx) e [x, y] sendo o comutador ([x, y] = xy - yx). A partir destes, conseguimos ver que se tratarmos o operador  $k_z$  na matriz (3.77) como um número teremos [ $\kappa, k_z$ ]=0, recuperando assim a matriz para o caso bulk dada por (2.70).

Seguindo o mesmo procedimento descrito na seção 3.6 para a adição das bandas  $|iS\uparrow\rangle$ ,  $|iS\downarrow\rangle$  na matriz (3.77) obtemos

$$\mathcal{H}_{|AM\rangle}^{8\times8} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{cc}^{2\times2} & \mathcal{H}_{cv}^{2\times6} \\ (\mathcal{H}_{cv}^{2\times6})^{\dagger} & \mathcal{H}_{vv}^{6\times6} \end{pmatrix} , \qquad (3.76)$$

agora porém para um poço quântico, onde

$$\mathcal{H}_{\nu\nu}^{6\times6} = \begin{pmatrix} U+V & -\bar{S}_{-} & R & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{-} & -\sqrt{2}R \\ -\bar{S}_{-}^{\dagger} & U-V & C & R & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{-} \\ R^{\dagger} & C^{\dagger} & U-V & \bar{S}_{+}^{\dagger} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{+} & -\sqrt{2}V \\ 0 & R^{\dagger} & \bar{S}_{+} & U+V & \sqrt{2}R^{\dagger} & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{+} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{-}^{\dagger} & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{+}^{\dagger} & \sqrt{2}R & U-\Delta & C \\ -\sqrt{2}R^{\dagger} & -\sqrt{\frac{3}{2}}\bar{S}_{-}^{\dagger} & -\sqrt{2}V & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_{+}^{\dagger} & C^{\dagger} & U-\Delta \end{pmatrix},$$
(3.77)

sendo os novos parâmetros de Luttinger relacionados aos antigos por

$$\gamma_1 = \gamma_1^L - \frac{E_P}{3E_g} , \qquad (3.78)$$

$$\gamma_2 = \gamma_2^L - \frac{E_P}{6E_g} , \qquad (3.79)$$

$$\gamma_3 = \gamma_3^L - \frac{E_P}{6E_g} \ . \tag{3.80}$$

$$\kappa = \kappa^L - \frac{E_P}{6E_q} , \qquad (3.81)$$

$$\mu = \mu^L \tag{3.82}$$

e

$$\bar{\gamma} = \bar{\gamma^L} - \frac{E_P}{6E_g} \,. \tag{3.83}$$

Para a obtenção do termo  $\mathcal{H}_{cc}^{2\times 2}$  basta olharmos para a Eq. (3.17) junto ao fato de apenas  $k_z$  ser um operador obtendo

$$\mathcal{H}_{cc}^{2\times 2} = \left[ E_c(z) + A' k_{\parallel}^2 + k_z A' k_z \right] \mathbf{1}_{2\times 2} , \qquad (3.84)$$

onde o coeficiente A é dado por

$$A = \frac{\hbar^2}{2m_0} + A'.$$
 (3.85)

No formalismo da função envelope que utilizamos, consideramos que as funções de Bloch são iguais para materiais diferentes. Dessa maneira, o elemento de matriz de Kane P não depende de z, e portanto  $\mathcal{H}^{2\times 6}_{cv}$  tem a mesma forma de (2.90), i.e.,

$$\mathcal{H}_{cv}^{2\times6} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_{+} & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_{z} & \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_{-} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{z} & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{-} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_{+} & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_{z} & \frac{1}{\sqrt{2}}k_{-}P & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{+} & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{z} \end{pmatrix}.$$
(3.86)

O Hamiltoniano 3.76 pode ser visto completamente

CAPÍTULO 3. APROXIMAÇÃO DA FUNÇÃO ENVELOPE (EFA) E O HAMILTONIANO PARA UMA HETEROESTRUTURA

(3.87)

\_

$$\mathcal{H}_{|\lambda\lambda\lambda\rangle}^{B\times B} = \begin{pmatrix} T & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_{+} & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_{z} & \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_{-} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{z} & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{z} \\ 0 & T & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_{+} & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_{z} & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_{-} & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{+} & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{z} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_{-} & 0 & U+V & -\tilde{S}_{-} & R & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{S}_{-} & -\sqrt{2}R \\ \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_{z} & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_{-} & -\tilde{S}_{-}^{T} & U-V & C & R & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{2}{3}}\tilde{S}_{-} \\ \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_{+} & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_{z} & R^{T} & C^{T} & U-V & \tilde{S}_{+}^{T} & -\sqrt{\frac{2}{3}}\tilde{S}_{+} & -\sqrt{2}V \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_{+} & 0 & R^{T} & \tilde{S}_{+} & U+V & \sqrt{2}R^{T} & \frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{S}_{+} & -\sqrt{2}V \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{z} & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{z} & -\sqrt{2}R^{T} & -\sqrt{\frac{2}{3}}\tilde{S}_{+}^{T} & \sqrt{2}R & U-\Delta & C \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{+} & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{z} & -\sqrt{2}R^{T} & -\sqrt{2}\tilde{S}_{+}^{T} & -\sqrt{2}V & \frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{S}_{+}^{T} & 0 - \Delta \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{+} & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_{z} & -\sqrt{2}R^{T} & -\sqrt{2}\tilde{S}_{+}^{T} & 0 - \tilde{S}_{-}^{T} &$$
com

$$T = E_c(z) + A'k_{\parallel}^2 + k_z A'k_z, \qquad (3.88)$$

$$U = E_{\nu}(z) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \gamma_1 k_{\parallel}^2 + k_z \gamma_1 k_z \right), \qquad (3.89)$$

$$V = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_2 k_{\parallel}^2 - 2k_z \gamma_2 k_z), \qquad (3.90)$$

$$R = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{3}(\mu k_+^2 - \bar{\gamma}k_-^2), \qquad (3.91)$$

$$\bar{S}_{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{3}k_{\pm}\left(\{\gamma_3, k_z\} + [\kappa, k_z]\right), \qquad (3.92)$$

$$\tilde{S}_{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{3}k_{\pm} \left(\{\gamma_3, k_z\} - \frac{1}{3}[\kappa, k_z]\right), \qquad (3.93)$$

$$C = \frac{\hbar^2}{m_0} k_{-}[\kappa, k_z],$$
(3.94)

$$\bar{\boldsymbol{\gamma}} = (\boldsymbol{\gamma}_3 - \boldsymbol{\gamma}_2)/2, \tag{3.95}$$

$$\mu = (\gamma_3 + \gamma_2)/2. \tag{3.96}$$

onde utilizamos nesse capítulo e no capítulo anterior as definições utilizadas em.<sup>42</sup>

#### 3.1.5 Método ad-hoc/Simetrização

Para uma melhor interpretação do Hamiltoniano (3.10) vamos fazer a substituição  $\vec{k} \rightarrow -i \vec{\nabla}$  e utilizar a notação de Dirac, i. e.,

$$\left(\frac{\hbar^{2}\vec{k}^{2}}{2m_{0}}+E_{n}(\vec{r})\right)f_{n}(\vec{r})+\sum_{m\in A}\left[\frac{\hbar}{m_{0}}\left\langle n\left|\vec{p}\right.\right|m\right\rangle \cdot\vec{k}+\frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}}\sum_{l\in B}\left\langle n\left|\vec{p}\right.\right|l\right\rangle \cdot\vec{k}\frac{1}{\left(E-H_{ll}\right)}\vec{k}\cdot\left\langle l\left|\vec{p}\right.\right|m\right\rangle\right]f_{m}(\vec{r})=Ef_{n}(\vec{r})$$
(3.97)

Nosso objetivo é comparar a equação acima com (2.42). Para isso, assumiremos algumas considerações em (2.42).

A primeira consideração é a escolha de  $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$  como sendo a base que diagonaliza o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{SO}$ . A segunda faz referência à exclusão dos termos de correção de segunda ordem no Hamiltoniano efetivo (2.43). Já a terceira refere-se a tratar o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{k,p}$  como sendo a parte dominante na interação com as bandas remotas.

Utilizando primeiramente a segunda e a terceira considerações obtemos

$$\sum_{m \in A} \left\{ \left\langle n \left| \mathcal{H}_{SO} + \mathcal{H}_{k.p} \left| m \right\rangle + \sum_{l \in B} \frac{\left\langle n \left| \mathcal{H}_{k.p} \left| l \right\rangle \left\langle l \right| \mathcal{H}_{k.p} \left| m \right\rangle}{E - \mathcal{H}_{ll}} - \left( E_{n,\sigma,\vec{k}} - E_{m,\vec{0}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{n,m} \right\} a_{m,\vec{k}} = 0 \right\}$$

$$(3.98)$$

a qual se torna

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + E_n\right) a_{n,\vec{k}} + \sum_{m \in A} \left\{ \langle n | \mathcal{H}_{k,p} | m \rangle + \sum_{l \in B} \frac{\langle n | \mathcal{H}_{k,p} | l \rangle \langle l | \mathcal{H}_{k,p} | m \rangle}{E - H_{ll}} \right\} a_{m,\vec{k}} = 0, \quad (3.99)$$

quando utilizamos a primeira consideração. Vale lembrar aqui que na definição da energia  $E_n$  já leva em consideração o termo  $\mathcal{H}_{SO}$ . Se usarmos agora a definição de  $\mathcal{H}_{k.p}$  obtemos

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + E_n\right) a_{n,\vec{k}} + \sum_{m \in A} \left\{ \frac{\hbar}{m_0} \left\langle n \right| \vec{p} \left| m \right\rangle \cdot \vec{k} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{l \in B} \frac{\left\langle n \right| \vec{p} \left| l \right\rangle \cdot \vec{k} \left\langle l \right| \vec{p} \left| m \right\rangle \cdot \vec{k}}{E - H_{ll}} \right\} a_{m,\vec{k}} = 0 ,$$
(3.100)

o que por sua vez, é "identica" à equação 3.10 se fizermos as seguintes correspondências

$$\vec{k} \to -i\vec{\nabla},$$

$$a_{m,\vec{k}} \to f_{m,\vec{k}}(\vec{r}),$$

$$E_n \to E_n(\vec{r}),$$

$$\frac{\langle n|\vec{p}|l\rangle \cdot \vec{k} \langle l|\vec{p}|m\rangle \cdot \vec{k}}{E-E_l} \to \langle n|\vec{p}|l\rangle \cdot \vec{k} \frac{1}{E-E_l(\vec{r})} \langle l|\vec{p}|m\rangle \cdot \vec{k}.$$
(3.101)

As equações acima mostram que respeitando as correspondências em (3.101), o método *ad-hoc* é válido. Vale frisar também que as correspondências devem ser feitas antes de se realizar o somatório em (3.100), caso contrário isso pode levar a erros que discutiremos na próxima subseção.

#### 3.1.6 Utilização da simetrização de forma incorreta

Em diversos textos a simetrização junto ao método ad-hoc vem sendo aplicados ao método k.p como alternativa à derivação via aproximação da função envelope. Aqui mos-

traremos dois exemplos onde tais simetrizações, geralmente descritas por

$$k_z A \rightarrow \frac{k_z A + A k_z}{2}$$
 (3.102)

$$k_z^2 A \rightarrow k_z A(z) k_z$$
 (3.103)

$$Ak_x k_y \quad \to \quad \frac{k_x A k_y + k_y A k_x}{2}, \tag{3.104}$$

são falhas quando aplicadas de forma errada.

#### **3.1.6.1** Simetrização do termo $\langle X | \mathcal{H}^{DKK} | Y \rangle$

Mostraremos aqui um exemplo onde a simetrização dada por (3.104) não nos dá um resultado consistente com o formalismo da função envelope.

A partir do método k.p sabemos via a equação matricial (2.58) que a contribuição de bandas remotas somado ao termo  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$  nos dá o elemento  $\langle X | \mathcal{H}^{DKK} | Y \rangle$ , o qual é explicitamente dado por

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem} = (F - G + H_1 - H_2)k_x k_y. \tag{3.105}$$

Utilizando a simetrização (3.104) obtemos

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem} = k_x \frac{(F - G + H_1 - H_2)}{2} k_y + k_y \frac{(F - G + H_1 - H_2)}{2} k_x$$
  
=  $\partial_x \frac{(G - F + H_2 - H_1)}{2} \partial_y + \partial_y \frac{(G - F + H_2 - H_1)}{2} \partial_x.$  (3.106)

No entanto, utilizando o formalismo da função envelope via equação (3.12) vemos que a contribuição de bandas remotas para o elemento  $\langle X | \mathcal{H}_{HETERO}^{DKK} | Y \rangle$  é dada por

$$\mathcal{H}_{xy}^{rem} = \partial_x \left( G - F \right) \partial_y + \partial_y \left( H_2 - H_1 \right) \partial_x, \qquad (3.107)$$

o que nos mostra uma incosistência na simetrização utilizada por nós.

#### 3.1.6.2 Simetrização do termo $\bar{S}^l_{\pm}$

Um outro exemplo da utilização errada da simetrização aparece quando simetrizamos a matriz em bulk dada por (2.89), sem conseguir recuperar o termo [ $\kappa$ ,  $k_z$ ]. Para ver como

isso se dá, tomemos o termo  $\bar{S}^L_{\pm}$  dado por (2.74) e utilizemos a simetrização descrita em (3.103). Temos então

$$\bar{S}_{\pm}^{L} = -\frac{\hbar^{2}}{m_{0}}\sqrt{3}k_{\pm}(\gamma_{3}^{L}k_{z}) 
= -\frac{\hbar^{2}}{m_{0}}\sqrt{3}k_{\pm}\left(\frac{\gamma_{3}^{L}k_{z} + k_{z}\gamma_{3}^{L}}{2}\right) 
= -\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}\sqrt{3}k_{\pm}\{\gamma_{3}^{L}, k_{z}\}.$$
(3.108)

Nota-se claramente que a simetrização não nos deu o mesmo resultado que o formalismo da função envelope, já que para este último temos

$$\bar{S}_{\pm}^{L} = -\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}\sqrt{3}k_{\pm}\left(\left\{\gamma_{3}^{L}, k_{z}\right\} + \left[\kappa^{L}, k_{z}\right]\right).$$
(3.109)

Concluímos assim, que a simetrização/método ad-hoc quando aplicados diretamente aos elementos da matriz podem nos fornecer valores incorretos.

### CAPÍTULO 4

## HAMILTONIANOS EFETIVOS PARA A BANDA DE CONDUÇÃO EM DIFERENTES DIREÇÕES

Neste capítulo derivaremos o Hamiltoniano efetivo que descreve os elétrons da banda de condução de um poço quântico em diferentes direções de crescimento. Este pode ser essencialmente dividido em dois termos distintos: (i) o termo diagonal (independente de spin) que contém o potencial de confinamento e leva em conta a correção de massa devido ao acoplamento com outras bandas e (ii) o termo não diagonal ou termo de spin-órbita representado pelos Hamiltonianos de Rashba e de Dresselhaus. O Hamiltoniano spinórbita quebra a degenerescência de spin e como veremos mais adiante, é o responsável pela relaxação destes.

Para obter esse Hamiltoniano efetivo aplicamos a teoria de perturbação de Löwdin (ou equivalentemente o procedimento folding down) ao Hamiltoniano de Kane (A.26).

#### Hamiltoniano do poço quântico crescido na direção [001] 4.1 com correção da massa do elétron

O termo diagonal contendo apenas termos quadráticos no momento  $\vec{k}$  é dado por

$$\mathcal{H}_{QW}^{[001]} = \left[\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{[001]}^*} - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_{[001]}^*} \frac{\partial}{\partial z} + V_C(z) + \delta_6^{[001]} h_w(z)\right],\tag{4.1}$$

onde *m*<sup>\*</sup> representa a massa efetiva do elétron (em princípio pode ser corrigida por outras bandas),  $V_G(z)$  o potencial elétrico externo aplicado e a contribuição da região doadora (veja Fig. 7.1) e  $\delta_6 h_w(z)$  o potencial estrutural ( $\delta_6$  é o offset da banda de condução como mostra a Fig. (3.1)). Desse modo, temos a equação de autovalores

$$\mathcal{H}_{QW}^{[001]} \left| \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right\rangle_{[001]} = \varepsilon_{k_{\parallel}, n, \sigma}^{[001]} \left| \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right\rangle_{[001]}.$$

$$(4.2)$$

Analisando a equação acima podemos separar as váriáveis de modo que os autoestados possam ser escritos como

$$\left\langle \vec{r} \middle| \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right\rangle_{[001]} = \frac{e^{i\vec{k}_{\parallel}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{A}} \varphi^{[001]}_{n,\sigma}(z),$$
 (4.3)

e os autovalores

$$\varepsilon_{k_{\parallel},n,\sigma}^{[001]} = \frac{\hbar^2 \vec{k}_{\parallel}^2}{2m_{[001]}^{\star}} + \varepsilon_{n,\sigma}^{[001]}, \qquad (4.4)$$

onde n = 0, 1, 2, ... é o chamado índice de sub-banda (o confinamento gera a discretização dos níveis de energia) e  $\sigma$  é o índice de spin, assumindo os valores  $\sigma = \uparrow (\downarrow)$ . O confinamento na direção z é representado pela função  $\varphi_{n,\sigma}^{[001]}$  (função envelope). No plano xy no entanto, os elétrons são livres e por isso são representados por ondas planas.

#### Potencial de Hartree e o cálculo auto-consistente 4.2

Até agora, todos os nossos cálculos foram feitos para apenas um elétron (single particle). Para levarmos em conta o efeito de muitos corpos no nosso Hamiltoniano adicionamos aos potenciais  $V_G(z)$  e  $\delta_6^{[001]}h_w(z)$  o potencial de Hartree  $V_e^{[001]}(z)$ . Como consequência, a

Eq. (4.2) deve ser resolvida de maneira auto-consistente, i.e, juntamente com a equação de Schrödinger devemos resolver também a equação de Poisson. Substituindo (4.4) em (4.2) obtemos uma equação para as funções envelope  $\varphi_{n,\sigma}$  do poço quântico,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{m_{[001]}^{\star}}\frac{\partial}{\partial z}+V_{sc}(z)\right]\varphi_{n,\sigma}^{[001]}(z)=\varepsilon_{n,\sigma}^{[001]}\varphi_{n,\sigma}^{[001]},\tag{4.5}$$

onde  $V_{sc}(z) = V_G(z) + V_e^{[001]}(z) + \delta_6^{[001]} h_w(z)$  e sc denota *self-consistent*.

Como já mencionado, a função de onda  $\varphi_{n,\sigma}^{[001]}$  deve ser calculada de forma autoconsistente, ou seja, primeiramente resolvemos (4.5) encontrando a função de onda  $\varphi_{n,\sigma}^{[001]}$  e então contruímos a densidade de carga eletrônica,

$$\rho_{e}^{[001]}(z) = \frac{e}{A} \sum_{k_{\parallel}, n, \sigma} \left| \varphi_{n, \sigma}^{[001]}(z) \right|^{2} f\left( \varepsilon_{k_{\parallel} n, \sigma}^{[001]} \right),$$
(4.6)

onde

$$f\left(\varepsilon_{k_{\parallel}n,\sigma}\right) = \frac{1}{1 + e^{\left(\varepsilon_{k_{\parallel}n,\sigma}-\mu\right)/k_{B}T}}$$
(4.7)

é a distribuição de Fermi-Dirac. A partir dessa densidade de cargas  $\rho_e^{[001]}(z)$  determinamos o potencial devido à distribuição eletrônica  $V_e^{[001]}$  via equação de Poisson,<sup>34</sup>

$$\frac{d^2}{dz^2} V_e^{[001]}(z) = -\frac{e}{\epsilon_r \epsilon_0} \rho_e^{[001]}(z), \qquad (4.8)$$

onde  $\epsilon_0$  é a permissividade e  $\epsilon_r$  é a constante dielétrica.<sup>52</sup> Encontrado este potencial, o inserimos em (4.5) e realizamos o mesmo procedimento até que o valor da energia convirja.

O potencial V<sub>G</sub> é obtido resolvendo-se a equação de Poisson para a região doadora,

$$\frac{d^2}{dz^2}V_G(z) = -\frac{e}{\epsilon_r\epsilon_0}\rho_d(z).$$
(4.9)

As distribuições de carga em 3D ( $\rho_e, \rho_d$ ) são relacionadas às distribuições em 2D via

$$n_i^{2D} = \frac{1}{eA} \int dV \rho_i(z). \tag{4.10}$$

As duas primeiras auto-energias da Eq. (4.4) obtidas via cálculo auto-consistente são

ilustradas na Fig. (4.1), a qual nos mostra a degenerescência em spin, uma vez que não temos a interação spin-órbita ou campos magnéticos externos para quebrá-la.



Figura 4.1 – Grafíco que ilustra as energias  $\varepsilon_{k_{\parallel},0,\sigma}$  e  $\varepsilon_{k_{\parallel},1,\sigma}$ . Ambos os eixos estão em unidades arbitrárias.

#### Hamiltoniano de Rashba na direção de crescimento [001] 4.3

O Hamiltoniano efetivo de Rashba possui dependência linear em  $\vec{k}$  e só aparece em heteroestruturas. Como veremos a seguir, este fato está diretamente relacionado aos potenciais estrutural e de Hartree e possíveis potenciais externos. Esta interação SO pode ser obtida apenas a partir do Hamiltoniano (A.26),<sup>35</sup> i.e., sua forma não depende da presença de bandas remotas em constraste com o Hamiltoniano de Dresselhaus (veja próxima seção). Em (A.26) temos  $k_z = -i\partial_z$  e um potencial dependente de z somado à diagonal.

A obtenção desse Hamiltoniano não será detalhada aqui. A dedução deste é feita em detalhes em.<sup>35,51</sup>

Assim, sequindo as referências<sup>35,51</sup> temos

$$\mathcal{H}_{Rashba}^{[001]} = \eta^{[001]}(z) \begin{pmatrix} 0 & -ik_{-} \\ ik_{+} & 0 \end{pmatrix} = \eta^{[001]}(z) \left[ k_{x}\sigma_{y} - k_{y}\sigma_{x} \right], \quad (4.11)$$

onde

$$\eta(z) = \eta_w^{[001]} \frac{dh_w(z)}{dz} - \eta_H^{[001]} \frac{dV_H^{[001]}(z)}{dz}, \qquad (4.12)$$

com

$$\eta_{H} = \frac{P^{2}}{3} \left[ \frac{1}{E_{g}^{2}} - \frac{1}{\left(E_{g} + \Delta_{g}\right)^{2}} \right],$$
(4.13)

$$\eta_w^{[001]} = \frac{P^2}{3} \left[ \frac{\delta_8^{[001]}}{E_g^2} - \frac{\delta_7^{[001]}}{\left(E_g + \Delta_g\right)^2} \right],\tag{4.14}$$

onde  $V_H = V_e + V_G$  e  $\delta_7$  e  $\delta_8$  correspondem aos offsets da banda de valência, veja Fig. (3.2).<sup>35</sup>

#### 4.4 Hamiltoniano de Dresselhaus na direção [001]

O Hamiltoniano de Dresselhaus<sup>53</sup> possui dependência cúbica em  $\vec{k}$  e já aparece em bulk para cristais zincblende. Esse Hamiltoniano provém da assimetria de inversão espacial que o cristal zincblende possui e por isso, é muitas vezes também chamado de Hamiltoniano BIA (do inglês *bulk inversion assymetry*). Como mencionado, diferentemente do Hamiltoniano de Rashba, o termo relevante da interação spin-órbita de Dresselhaus aparece quando levamos em conta o acoplamento da banda de condução com bandas remotas.

Na seção 3.6 derivamos o Hamiltoniano

$$\tilde{\mathcal{H}}_{[001]}^{DKK} = \begin{pmatrix} Ak^2 & ik_x P & ik_y P & ik_z P \\ -ik_x P & \tilde{L}k_x^2 + \tilde{M}(k_y^2 + k_z^2) & \tilde{N}k_x k_y & \tilde{N}k_x k_z \\ -ik_y P & \tilde{N}k_y k_x & \tilde{L}k_y^2 + \tilde{M}(k_x^2 + k_z^2) & \tilde{N}k_y k_z \\ -ik_z P & \tilde{N}k_z k_x & \tilde{N}k_z k_y & \tilde{L}k_z^2 + \tilde{M}(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix},$$
(4.15)

escrito na base  $|S\rangle$ ,  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$ ,  $|Z\rangle$ , que sabemos não conter as todas contribuições quadráticas devido ao termo  $\mathcal{H}_{k.p}$ . A parte não incluída corresponde ao acoplamento dos estados  $|S\rangle$  e  $|X_i\rangle$  através das bandas remotas (classe B), i.e.,

$$\sum_{l\in B} \frac{\langle s|\frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\cdot\vec{p}|l\rangle\langle l|\frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\cdot\vec{p}|X_i\rangle}{\left(\frac{E_c+E_v}{2}-H_{ll}\right)}.$$
(4.16)

Utilizando teoria de grupos, podemos mostrar que caso haja simetria de inversão, i.e.,  $(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$ , a contribuição devido a (4.16) é nula. No caso em que estamos interessados, ou seja, em sistemas que não possuem um centro de inversão (estrutura zincblende), esse termo é não nulo.

Para o cálculo de (4.16) tomamos a banda de condução como nossa classe A, representada por  $|AM_1\rangle$  e  $|AM_2\rangle$ , correspondentes respectivamente aos estados  $|iS\uparrow\rangle$  e  $|iS\downarrow\rangle$ . Se a classe B for representada apenas pelos estados  $|AM_i\rangle$  com i = 3, ...8, i.e.,  $|X\uparrow\rangle$ ,  $|Y\uparrow\rangle$ ,  $|Z\uparrow\rangle$ ,  $|X\downarrow\rangle$ ,  $|Y\downarrow\rangle$  e  $|Z\downarrow\rangle$  respectivamente, aplicando-se a teoria de perturbação de Löwdin (ou folding down),

$$\mathcal{H}_{nm}^{ef} = \mathcal{H}_{nm} + \sum_{l \in B} \frac{\mathcal{H}_{nl} \mathcal{H}_{lm}}{\tilde{E}_n - \mathcal{H}_{ll}} + \sum_{l \in B} \sum_{p \in B} \frac{\mathcal{H}_{nl} \mathcal{H}_{lp} \mathcal{H}_{pm}}{\left(\tilde{E}_n - \mathcal{H}_{ll}\right) \left(\tilde{E}_n - \mathcal{H}_{pp}\right)} + \cdots , \qquad (4.17)$$

ao Hamiltoniano (3.87), i.e.,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{|AM\rangle}^{8 \times 8}$ , não encontramos nenhum termo proporcional a  $k^3$ , o que já era esperado uma vez que o Hamiltoniano (3.87) foi derivado a partir do Hamiltoniano (4.15) que não contém elementos devido a ausência da simetria de inversão. Torna-se assim necessária a adição dos termos devido a ausência da simetria de inversão a  $\mathcal{H}_{|AM\rangle}^{8 \times 8}$  e consequentemente a  $\tilde{\mathcal{H}}^{DKK}$ .

Adicionando esses termos dados pela expressão (4.16) obtemos

$$\tilde{\mathcal{H}}_{[001]}^{DKK} = \begin{pmatrix} Ak^2 & ik_x P + Bk_y k_z & ik_y P + Bk_x k_z & ik_z P + Bk_x k_y \\ -ik_x P + Bk_y k_z & \tilde{L}k_x^2 + \tilde{M} \left(k_y^2 + k_z^2\right) & \tilde{N}k_x k_y & \tilde{N}k_x k_z \\ -ik_y P + Bk_x k_z & \tilde{N}k_y k_x & \tilde{L}k_y^2 + \tilde{M} \left(k_x^2 + k_z^2\right) & \tilde{N}k_y k_z \\ -ik_z P + Bk_x k_y & \tilde{N}k_z k_x & \tilde{N}k_z k_y & \tilde{L}k_z^2 + \tilde{M} \left(k_x^2 + k_y^2\right) \end{pmatrix}$$
(4.18)

O Hamiltoniano (4.18) é degenerado em spin (utilizamos o formalismo do grupo simples). Reescrevendo este na base do momento angular descrita na Tab. (A.3) temos

(4.19)								
$\frac{B(k_x+ik_y)k_z}{\sqrt{3}}$	$-\frac{iBk_xk_y}{\sqrt{3}}$	0	0	0	0	0	0	
$\frac{iBk_xk_y}{\sqrt{3}}$	$-\frac{B(k_x-ik_y)k_z}{\sqrt{3}}$	0	0	0	0	0	0	
0	$-\frac{B(k_x+ik_y)k_z}{\sqrt{2}}$	0	0	0	0	0	0	
$-\frac{B(k_x+ik_y)k_z}{\sqrt{6}}$	$-i\sqrt{\frac{2}{3}}Bk_xk_y$	0	0	0	0	0	0	
$-i\sqrt{\frac{2}{3}}Bk_xk_y$	$-\frac{B(k_x-ik_y)k_z}{\sqrt{6}}$	0	0	0	0	0	0	
$-\frac{B(k_x-ik_y)k_z}{\sqrt{2}}$	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	$-\frac{B(k_x+ik_y)k_z}{\sqrt{6}}$	$i\sqrt{\frac{2}{3}}Bk_{x}k_{y}$	$-\frac{B(k_x-ik_y)k_z}{\sqrt{2}}$	$-\frac{B(k_x+ik_y)k_z}{\sqrt{3}}$	$\frac{iBk_xk_y}{\sqrt{3}}$	
0	0	$-\frac{B(k_x+ik_y)k_z}{\sqrt{2}}$	$i\sqrt{\frac{2}{3}}Bk_xk_y$	$-\frac{B(k_x-ik_y)k_z}{\sqrt{6}}$	0	$-\frac{iBk_xk_y}{\sqrt{3}}$	$\frac{B(k_x - ik_y)k_z}{\sqrt{3}}$	
$\mathcal{H}^{8 \times 8}_{BlA[001]} =$								

O Hamiltoniano final  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{|AM\rangle}^{8\times8} + \mathcal{H}_{B|A}^{8\times8}$  contém todos os termos até segunda ordem em  $\mathcal{H}_{k.p}$ . Aplicando a este a Eq. (4.17) e mantendo somente termos cúbicos em  $\vec{k}$  obtemos o Hamiltoniano de Dresselhaus, dado por

$$\mathcal{H}_{Dresselhau}^{[001]} = \gamma \left( \begin{array}{cc} k_z \left( k_x^2 - k_y^2 \right) & -ik_y \left( k_z^2 - k_x^2 \right) + k_x \left( k_y^2 - k_z^2 \right) \\ ik_y \left( k_z^2 - k_x^2 \right) + k_x \left( k_y^2 - k_z^2 \right) & -k_z \left( k_x^2 - k_y^2 \right) \end{array} \right), \quad (4.20)$$

onde

$$\gamma \equiv \frac{2P B\Delta}{3E_g \left(E_g + \Delta\right)},\tag{4.21}$$

que está relacionado apenas aos parâmetros de bulk do material.

#### 4.5 Hamiltonianos efetivos na direção de crescimento [110]

Como discutido no apêndice B, não existe um argumento simples para nos dizer que Hamiltonianos em diferentes direções devem possuir a mesma forma. Na seção 4.1 e no apêndice D, mostramos respectivamente que o Hamiltoniano do poço quântico e o Hamiltoniano de Rashba possuem a mesma forma algébrica em qualquer direção de crescimento. Este fato não deve ser entendido como "Hamiltonianos iguais em qualquer direção de crescimento", uma vez que os parâmetros  $\eta(z)$ ,  $\delta_6$ ,  $\delta_7 e \delta_8$  podem depender da direção em que a heteroestrutura foi crescida. O Hamiltoniano de Dresselhaus, no entanto, depende da direção de crescimento como demonstrado no apendice C.

Dessa forma, utilizando os resultados da seção 4.1 e dos apêndice C e D temos

$$\mathcal{H}_{QW}^{[110]} = \left[\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{[110]}^{\star}} + \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_{[110]}^{\star}} \frac{\partial}{\partial z} + V_G(z) + V_H^{[110]}(z) + \delta_6^{[110]} h_w(z)\right], \quad (4.22)$$

para o Hamiltoniano do poço quântico,

$$\mathcal{H}_{Rashba}^{[110]} = \eta^{[110]}(z) \begin{pmatrix} 0 & -ik_{-} \\ ik_{+} & 0 \end{pmatrix} = \eta^{[110]}(z) \left[ k_{x}\sigma_{y} - k_{y}\sigma_{x} \right], \quad (4.23)$$

para o Hamiltoniano de Rashba e

$$\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} = \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} K_y \left( 2K_x^2 - K_y^2 + K_z^2 \right) & iK_z \left( -2K_x^2 + 4iK_xK_y - K_y^2 + K_z^2 \right) \\ -iK_z \left( -2K_x^2 - 4iK_xK_y - K_y^2 + K_z^2 \right) & -K_y \left( 2K_x^2 - K_y^2 + K_z^2 \right) \end{pmatrix},$$
(4.24)

para o Hamiltoniano de Dresselhaus.

### **CAPÍTULO 5**

# OBTENÇÃO DOS HAMILTONIANOS EFETIVOS PARA 2DEGS EM DIFERENTES DIREÇÕES DE CRESCIMENTO

Neste capítulo deduzimos e apresentamos os primeiros resultados novos que essa dissertação aborda. Mais especificamente, deduzimos para duas diferentes direções de crescimento, os Hamiltonianos efetivos para um 2DEG que levam em conta a influência da segunda subbanda de mais baixa energia. Para levar em conta essa influência, primeiramente projetamos os Hamiltonianos de Dresselhaus nas duas primeiras subbandas de mais baixa energia para posteriormente utilizarmos a teoria de perturbação de Löwdin (ou o equivalentemente método "folding down") afim de obtermos um Hamiltoniano efetivo para a primeira subbanda que leva em conta essa contribuição.

### 5.1 Projeção

Utilizando os resultados capítulo anterior, sabemos que nosso Hamiltoniano efetivo total sobre a banda de condução é dado por

$$\mathcal{H}_{2DEG}^{[abc]} = \mathcal{H}_{QW}^{[abc]} \mathbf{1}_{2\times 2} + \mathcal{H}_{Rashba}^{[abc]} + \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[abc]}, \tag{5.1}$$

onde [abc] representa a direção a qual nossa heteroestrutura foi crescida. Sabendo disso, iremos projetar esse Hamiltoniano nas duas primeiras subbandas (degeneradas em spin) do Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{QW}^{[abc]}$ , representadas aqui por

$$\left|\vec{k}_{\parallel}, 0, \uparrow\right\rangle_{[abc]}, \left|\vec{k}_{\parallel}, 0, \downarrow\right\rangle_{[abc]}, \left|\vec{k}_{\parallel}, 1, \uparrow\right\rangle_{[abc]}, \left|\vec{k}_{\parallel}, 1, \downarrow\right\rangle_{[abc]}.$$
(5.2)

Projetando-se então o Hamiltoniano (5.1) nas subbandas (5.2), obtemos os correspondentes elementos de matriz

$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right| \mathcal{H}_{2DEG}^{[abc]} \left| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[abc]},$$
(5.3)

com n = 0, 1 e  $\sigma = \uparrow (\downarrow)$ , e consequentemente

$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{2DEG}^{[abc]} \middle| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[abc]} = \varepsilon_{k_{\parallel},n}^{[abc]} \delta_{nn'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} + \left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{Rashba}^{[abc]} + \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[abc]} \middle| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[abc]}.$$

$$(5.4)$$

5.2 Hamiltoniano 
$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right| \mathcal{H}_{2DEG}^{[001]} \left| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[001]}$$

Nesta seção, iremos encontrar o Hamiltoniano efetivo de um 2DEG confinado na direção [001], para as duas primeiras subbandas. Ou seja, iremos encontrar os elementos de matriz dados por (5.4), utilizando para isso [abc] = [001].

5.2.1 Cálculo da contribuição devido à 
$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right| \mathcal{H}_{Rashba}^{[001]} \left| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[001]}$$

Vamos primeiro calcular os elementos devido a projeção do Hamiltoniano  $\mathcal{H}^{[001]}_{Rashba}$ ,

$$\mathcal{H}_{Rashba}^{[001]} = \eta^{[001]}(z) \left( k_x \sigma_y - k_y \sigma_x \right).$$
(5.5)

Para  $\sigma = \sigma'$ , obtemos

$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{Rashba}^{[001]} \middle| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma \right\rangle_{[001]} = \left\langle \vec{k}_{\parallel} \middle| \vec{k}_{\parallel}' \right\rangle \langle n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{Rashba}^{[001]} \left| n', \sigma \right\rangle_{[001]}$$

$$= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \langle n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{Rashba}^{[001]} \left| n', \sigma \right\rangle_{[001]}$$

$$= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \langle n, \sigma \middle| \eta^{[001]}(z) \left( k_x \sigma_y - k_y \sigma_x \right) \left| n', \sigma \right\rangle_{[001]}$$

$$= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \langle n \middle| \eta^{[001]}(z) \left| n' \right\rangle_{[001]} \langle \sigma \middle| k_x \sigma_y - k_y \sigma_x \left| \sigma \right\rangle.$$
(5.6)

Utilizando agora

$$\sigma_{x} |\uparrow, \downarrow\rangle = |\downarrow, \uparrow\rangle \qquad \sigma_{y} |\uparrow, \downarrow\rangle = \pm i |\downarrow, \uparrow\rangle, \qquad (5.7)$$

obtemos

$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right| \mathcal{H}_{Rashba}^{[001]} \left| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma \right\rangle_{[001]} = 0.$$
(5.8)

Para  $\sigma \neq \sigma'$ , obtemos

$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{Rashba}^{[001]} \middle| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[001]} = \left\langle \vec{k}_{\parallel} \middle| \vec{k}_{\parallel}' \right\rangle \langle n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{Rashba}^{[001]} \left| n', \sigma' \right\rangle_{[001]}$$

$$= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \langle n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{Rashba}^{[001]} \left| n', \sigma' \right\rangle_{[001]}$$

$$= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \langle n, \sigma \middle| \eta^{[001]}(z) \left( k_x \sigma_y - k_y \sigma_x \right) \left| n', \sigma' \right\rangle_{[001]}$$

$$= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \langle n \middle| \eta^{[001]}(z) \left| n' \right\rangle_{[001]} \langle \sigma \middle| k_x \sigma_y - k_y \sigma_x \left| \sigma' \right\rangle$$

$$= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \langle n \middle| \eta^{[001]}(z) \left| n' \right\rangle_{[001]} \left[ k_x \langle \sigma \middle| \sigma_y \left| \sigma' \right\rangle - k_y \langle \sigma \middle| \sigma_x \left| \sigma' \right\rangle \right].$$

$$(5.9)$$

Utilizando novamente as equações (5.7), obtemos

$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{Rashba}^{[001]} \middle| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[001]} = \mp i \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left\langle n \middle| \eta^{[001]}(z) \middle| n' \right\rangle_{[001]} \left( k_x \mp i k_y \right).$$
 (5.10)

Combinando ambas equações (5.6) e (5.9) junto as definções<sup>35</sup>

$$\alpha_{0} = \langle 0 | \eta^{[001]}(z) | 0 \rangle_{[001]} \quad \alpha_{1} = \langle 1 | \eta^{[001]}(z) | 1 \rangle_{[001]} \quad \eta = \langle 0 | \eta^{[001]}(z) | 1 \rangle_{[001]}, \tag{5.11}$$

(5.12)

encontramos o Hamiltoniano  $\mathcal{H}^{[001]}_{Rashba}$  projetado nas duas primeiras subbandas,

$$\mathcal{H}_{\mathcal{R}}^{[001]} = \begin{pmatrix} 0 & -i\alpha_0 k_- & 0 & -i\eta k_- \\ i\alpha_0 k_+ & 0 & i\eta k_+ & 0 \\ 0 & -i\eta k_- & 0 & -i\alpha_1 k_- \\ i\eta k_+ & 0 & i\alpha_1 k_+ & 0 \end{pmatrix}.$$
 (5.13)

# 5.2.2 Cálculo da contribuição devido à $\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right| \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]} \left| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[001]}$

Iremos calcular agora a projeção devido ao Hamiltoniano  $\mathcal{H}^{[001]}_{\it Dresselhaus}$ ,

$$\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]} = \gamma \left[ k_x \left( k_y^2 - k_z^2 \right) \sigma_x + k_y \left( k_z^2 - k_x^2 \right) \sigma_y + k_z \left( k_x^2 - k_y^2 \right) \sigma_z \right]$$
(5.14)

Calculando então os elementos de projeção para  $\sigma = \sigma'$ , obtemos

$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right| \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]} \left| \vec{k}_{\parallel}, n', \sigma \right\rangle_{[001]} = \left\langle \vec{k}_{\parallel} \left| \vec{k}_{\parallel} \right\rangle \langle n, \sigma \right| \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]} \left| n', \sigma \right\rangle_{[001]} \right.$$

$$= \left. \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ k_x \left\langle \sigma \right| \sigma_x \left| \sigma \right\rangle \left( k_y^2 \delta_{nn'} - \langle n \right| k_z^2 \left| n' \right\rangle_{[001]} \right) \right.$$

$$+ \left. k_y \left\langle \sigma \right| \sigma_y \left| \sigma \right\rangle \left( \langle n \right| k_z^2 \left| n' \right\rangle_{[001]} - k_x^2 \delta_{nn'} \right) \right.$$

$$+ \left. \left\langle \sigma \right| \sigma_z \left| \sigma \right\rangle \langle n \right| k_z \left| n' \right\rangle_{[001]} \left( k_x^2 - k_y^2 \right) \right]$$

$$= \pm \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \beta_{i,1} \left( k_x^2 - k_y^2 \right), \qquad (5.15)$$

enquanto que para  $\sigma 
eq \sigma'$ , obtemos

$$\begin{split} \left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right| \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]} \left| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[001]} &= \left\langle \vec{k}_{\parallel} \left| \vec{k}_{\parallel}' \right\rangle \langle n, \sigma | \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]} \left| n', \sigma' \right\rangle_{[001]} \\ &= \left\langle \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ k_x \left\langle \overline{\sigma} \right| \overline{\sigma_x} \left| \overline{\sigma'} \right\rangle \left( k_y^2 \delta_{nn'} - \langle n \right| k_z^2 \left| n' \right\rangle_{[001]} \right) \right. \\ &+ \left\langle k_y \left\langle \overline{\sigma} \right| \overline{\sigma_y} \left| \overline{\sigma'} \right\rangle \left( \langle n \right| k_z^2 \left| n' \right\rangle_{[001]} - k_x^2 \delta_{nn'} \right) \\ &+ \left\langle \overline{\sigma} \right| \overline{\sigma_z} \left| \overline{\sigma'} \right\rangle \langle n \right| k_z \left| n' \right\rangle_{[001]} - k_x^2 \delta_{nn'} \right) \\ &+ \left\langle \overline{\sigma} \right| \overline{\sigma_z} \left| \overline{\sigma'} \right\rangle \langle n \left| k_z \left| n' \right\rangle_{[001]} - k_x^2 \delta_{nn'} \right) \\ &= \left\langle \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ k_x \left( \gamma k_y^2 \delta_{nn'} - \beta_{i,2} \right) \mp i k_y \left( \beta_{i,2} - \gamma k_x^2 \delta_{nn'} \right) \right] \\ &= \left\langle \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ \gamma \left( k_x k_y^2 \pm i k_x^2 k_y \right) \delta_{nn'} \mp \beta_{i,2} \left( k_x \pm i k_y \right) \right], \end{split}$$

$$(5.16)$$

onde utilizamos as seguintes definições

$$\beta_{0,j} = \gamma \langle 0 | k_z^j | 0 \rangle_{[001]} \quad \beta_{1,j} = \gamma \langle 1 | k_z^j | 1 \rangle_{[001]} \quad \beta_{2,j} = \gamma \langle 0 | k_z^j | 1 \rangle_{[001]}, \quad (5.17)$$

onde  $k_z = -i\partial_z \in \langle \vec{r} | n \rangle_{[001]} = \varphi_n^{[001]}(z).$ 

#### 5.2.2.1 Nulidade das constantes $\beta_{n,1}$ e $\beta_{n,3}$ e redefinição das contantes $\beta$

Escrevendo agora  $\varphi_n(z) = e^{i\theta_n^{[001]}} \tilde{\varphi}_n^{[001]}(z)$ , onde  $\tilde{\varphi}_n^{[001]}(z) = Re[\varphi_n^{[001]}(z)]$ , carregamos o caracter complexo de  $\varphi_n^{[001]}(z)$  na fase  $e^{i\theta_n^{[001]}}$ .

Sendo assim,

$$\beta_{n,1} = -i\gamma \int dz \varphi_n^{\star [001]}(z) \partial_z \varphi_n^{[001]}(z)$$

$$= -i\gamma \int dz \, e^{-i\theta_n} \tilde{\varphi}_n^{[001]}(z) e^{i\theta_n} \partial_z \tilde{\varphi}_n^{[001]}(z)$$

$$= -i\gamma \int dz \, \tilde{\varphi}_n^{[001]}(z) \partial_z \tilde{\varphi}_n^{[001]}(z). \qquad (5.18)$$

Integrando por partes,

$$\beta_{n,1} = \underbrace{-i\gamma\tilde{\varphi}_{n}^{[001]}(z)\tilde{\varphi}_{n}^{[001]}(z)|_{-\infty}^{+\infty}}_{= -\beta_{n,1},} + i\gamma \int dz \,\tilde{\varphi}_{n}^{[001]}(z)\partial_{z}\tilde{\varphi}_{n}^{[001]}(z)$$
(5.19)

concluindo assim que para n = 0, 1 obtemos

$$\beta_{n,1} = 0, \tag{5.20}$$

onde o mesmo argumento segue para a constante  $\beta_{n,3}$  já que esta tambem é impar em relação a derivada  $\partial_z$ . Logo, para n = 0, 1 temos

$$\beta_{n,3} = 0.$$
 (5.21)

Utilizando o resultado de que as constantes  $\beta_{0,j}$  e  $\beta_{1,j}$  são zero para qualquer *j* impar junto ao fato de que só tratamos nosso problema até terceira ordem em *k*, ou seja, até *j* = 3, redefinimos nossas constantes

$$\beta_0 = \beta_{0,2} = \gamma \langle 0 | k_z^2 | 0 \rangle_{[001]} \quad \beta_1 = \beta_{1,2} = \gamma \langle 1 | k_z^2 | 1 \rangle_{[001]}, \qquad (5.22)$$

Combinando agora ambos resultados, encontramos o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]}$  projetado nas duas primeiras subbandas,

$$\mathcal{H}_{\mathcal{D}}^{[001]} = \left(\begin{array}{cccc} 0 & \gamma \left(k_{x}k_{y}^{2} + ik_{x}^{2}k_{y}\right) & -i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2} - k_{y}^{2}\right) & -\beta_{2,2}k_{+} \\ -\beta_{0}k_{+} & -\beta_{0}k_{+} & 0 & -\beta_{2,2}k_{-} & i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2} - k_{y}^{2}\right) \\ -\beta_{0}k_{-} & 0 & -\beta_{2,2}k_{-} & i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2} - k_{y}^{2}\right) \\ i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2} - k_{y}^{2}\right) & -\beta_{2,2}k_{+} & 0 & \gamma \left(k_{x}k_{y}^{2} + ik_{x}^{2}k_{y}\right) \\ -\beta_{2,2}k_{-} & -i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2} - k_{y}^{2}\right) & \gamma \left(k_{x}k_{y}^{2} - ik_{x}^{2}k_{y}\right) & 0 \\ -\beta_{1}k_{-} & 0 & -\beta_{1}k_{-} \end{array}\right),$$
(5.23)

onde assumimos

$$\beta_0, \ \beta_1, \ \beta_{2,2} \in \mathbf{R} \tag{5.24}$$

já que  $eta_{i,2} \propto k_z^2$  e redefinimos

$$\beta_{2,m} \to (-i)^m \beta_{2,m} \tag{5.25}$$

(para  $m \neq 2$ ) afim de tratar  $\beta_{2,m}$  agora como um número real, dado por  $\gamma \langle 0 | \partial_z^m | 1 \rangle$ . Aqui, usaremos também a definição  $\beta_3 = \frac{\gamma}{4}k^2$ , obtendo desse modo

$$\mathcal{H}_{\mathcal{D}}^{[001]} = \begin{pmatrix} 0 & 4\left(k_{x}k_{y}^{2}+ik_{x}^{2}k_{y}\right)\frac{\beta_{3}}{k^{2}} & -i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2}-k_{y}^{2}\right) & -\beta_{2,2}k_{+} \\ -\beta_{0}k_{+} & -\beta_{0}k_{+} & 0 & -\beta_{2,2}k_{-} & i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2}-k_{y}^{2}\right) \\ -\beta_{0}k_{-} & 0 & -\beta_{2,2}k_{-} & i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2}-k_{y}^{2}\right) \\ i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2}-k_{y}^{2}\right) & -\beta_{2,2}k_{+} & 0 & 4\left(k_{x}k_{y}^{2}+ik_{x}^{2}k_{y}\right)\frac{\beta_{3}}{k^{2}} \\ -\beta_{1}k_{+} & -\beta_{2,2}k_{-} & -i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2}-k_{y}^{2}\right) & 4\left(k_{x}k_{y}^{2}-ik_{x}^{2}k_{y}\right)\frac{\beta_{3}}{k^{2}} & 0 \\ -\beta_{1}k_{-} & (5.26) \end{pmatrix}$$

Com isso, conseguimos escrever um dos primeiros resultados novos abordados nessa dis-

sertação: o Hamiltoniano efetivo para 2DEG nas duas subbandas de mais baixa energia, representado pelo Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{2DEG}^{[001]}$  projetado na base (5.2). Este Hamiltoniano generaliza o resultado do Hamiltoniano com acoplamento de Rashba intersubbanda,<sup>35</sup> pois este incluí os termos de Dresselhaus lineares e cúbicos.

$$\mathcal{H}_{2DEG}^{[001]} =$$

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{k_{\parallel},0} & 4\left(k_{x}k_{y}^{2}+ik_{x}^{2}k_{y}\right)\frac{\beta_{3}}{k^{2}} & -i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2}-k_{y}^{2}\right) & -\beta_{2,2}k_{+}-i\eta k_{-} \\ 4\left(k_{x}k_{y}^{2}-ik_{x}^{2}k_{y}\right)\frac{\beta_{3}}{k^{2}} & \varepsilon_{k_{\parallel},0} & -\beta_{2,2}k_{-}+i\eta k_{+} & i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2}-k_{y}^{2}\right) \\ -\beta_{0}k_{-}+i\alpha_{0}k_{+} & \varepsilon_{k_{\parallel},0} & -\beta_{2,2}k_{-}+i\eta k_{+} & i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2}-k_{y}^{2}\right) \\ i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2}-k_{y}^{2}\right) & -\beta_{2,2}k_{+}-i\eta k_{-} & \varepsilon_{k_{\parallel},1} & 4\left(k_{x}k_{y}^{2}+ik_{x}^{2}k_{y}\right)\frac{\beta_{3}}{k^{2}} \\ -\beta_{2,2}k_{-}+i\eta k_{+} & -i\beta_{2,1}\left(k_{x}^{2}-k_{y}^{2}\right) & 4\left(k_{x}k_{y}^{2}-ik_{x}^{2}k_{y}\right)\frac{\beta_{3}}{k^{2}} \\ -\beta_{1}k_{-}+i\alpha_{1}k_{+} & \varepsilon_{k_{\parallel},1} & \varepsilon_{k_{\parallel},1} \\ \end{pmatrix}$$

Afim de ilustrarmos o efeito do Hamiltoniano de Rashba (5.44) e Dresselhaus (5.26) sobre os autovalores do Hamiltoniano (5.27), trataremos apenas a primeira subbanda, o que corresponde a tomar as constantes de acoplamento intersubbandas como sendo zero, i.e.,  $\beta_{2,1} = \beta_{2,2} = \eta = 0$ . Com isso, obtemos o Hamiltoniano

$$\begin{pmatrix} & 4\left(k_{x}k_{y}^{2}+ik_{x}^{2}k_{y}\right)\frac{\beta_{3}}{k^{2}}\\ & \varepsilon_{k_{\parallel},0} & -\beta_{0}k_{+}-i\alpha_{0}k_{-}\\ & 4\left(k_{x}k_{y}^{2}-ik_{x}^{2}k_{y}\right)\frac{\beta_{3}}{k^{2}} & \varepsilon_{k_{\parallel},0}\\ & -\beta_{0}k_{-}+i\alpha_{0}k_{+} & \end{pmatrix},$$
(5.28)

degenerado em spin.

Analisando primeiramente o efeito isolado de (5.44), i.e., tomando  $\beta_0 = 0$  e diagonalizando então (5.28), obtemos a Fig. (5.1).

Analisando agora o efeito isolado de (5.26), i.e., tomando  $\alpha_0 = 0$  e diagonalizando então (5.28), obtemos a Fig. (5.2). Dessa maneira, vemos que o Hamiltoniano de Dresselhaus apenas gera uma não degenerecência em spin.



Figura 5.1 – Influência do Hamiltoniano de Rashba sobre os autovalores .

#### 5.2.3 Hamiltoniano efetivo para a primeira subbanda $|k, 0, \uparrow (\downarrow)\rangle_{[001]}$

Encontrado nosso Hamiltoniano (5.27), vamos agora utilizar a teoria de perturbação de Löwdin, descrita no capítulo 2, para encontrar um Hamiltoniano efetivo 2x2 para a subbanda de mais baixa energia  $|k, 0, \uparrow (\downarrow)\rangle_{[001]}$ , levando em conta assim a contribuição da segunda banda de condução de mais baixa energia,  $|k, 1, \uparrow (\downarrow)\rangle_{[001]}$ . Sendo assim, a classe A dos autoestados é dada por  $|k, 0, \uparrow (\downarrow)\rangle_{[001]}$  e indexada por m, já a classe B é dada por  $|k, 1, \uparrow (\downarrow)\rangle_{[001]}$  e indexada por l. Sendo assim, nosso Hamiltoniano efetivo final fica na forma

$$\mathcal{H}^{eff} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{11}^{eff} & \mathcal{H}_{12}^{eff} \\ \mathcal{H}_{12}^{eff \dagger} & \mathcal{H}_{22}^{eff} \end{pmatrix},$$
(5.29)

onde nesse ponto, se convém escrever  $k_x$  e  $k_y$  na forma polar, ou seja,

$$k_x = k\cos(\Psi), \qquad k_y = k\sin(\Psi). \tag{5.30}$$

Uma vez que o Hamiltoniano (5.27) só mantém termos até  $O(k^3)$ , para ser consistente quando calculado o Hamiltoniano efetivo dado por (5.29), deveremos manter somente os termos até essa mesma ordem, onde vale tomar o cuidado de que a definição de  $\beta_3$  contem



Figura 5.2 – Influência do Hamiltoniano de Dresselhaus sobre os autovalores .

 $k^2$ . Sendo assim, para m = m' = 1, obtemos

$$\mathcal{H}_{11}^{eff} = \frac{\hbar^2 \vec{k^2}}{2m^*} + \varepsilon_0 + \left[\frac{\left(\beta_{2,2}^2 + \eta^2\right) + 2\beta_{2,2}\eta\sin(2\Psi)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)}\right]k^2,\tag{5.31}$$

onde o mesmo resultado vale para m = m' = 2. Calculando agora para m = 1 e m' = 2, obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{12}^{eff} &= \left[-\sin(\Psi)(\alpha_{0} + i(\beta_{0} - \beta_{3})) + \cos(\Psi)(-i\alpha_{0} - (\beta_{0} - \beta_{3})) + i\beta_{3}sin(3\Psi) - \beta_{3}cos(3\Psi)\right]k \\ &+ \left[\frac{\beta_{2,1}sin(\Psi)(\beta_{2,2} - i\eta)}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})} - \frac{\beta_{2,1}sin(3\Psi)(\beta_{2,2} - i\eta)}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})}\right] \\ &+ \frac{i\beta_{2,1}cos(\Psi)(\beta_{2,2} + i\eta)}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})} + \frac{i\beta_{2,1}cos(3\Psi)(\beta_{2,2} + i\eta)}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})}\right]k^{3} \\ &+ \left[\frac{\cos(\Psi)\left(\beta_{2,2}\eta(\alpha_{0} - 2\alpha_{1} + i(\beta_{0} - 2\beta_{1})\right) + \eta^{2}(\beta_{0} + i(\alpha_{0} - \alpha_{1})\right) + \beta_{2,2}^{2}(i\alpha_{0} + \beta_{0} - \beta_{1})\right)}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} \\ &+ \frac{\cos(3\Psi)\left(-\beta_{2,2}\eta(\alpha_{0} + i\beta_{0}) + i\alpha_{1}\beta_{2,2}^{2} + \beta_{1}\eta^{2}\right)}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} \\ &+ \frac{\sin(\Psi)\left(\beta_{2,2}\eta(i\alpha_{0} - 2i\alpha_{1} + \beta_{0} - 2\beta_{1}) + \eta^{2}(\alpha_{0} - \alpha_{1} + i\beta_{0}) + \beta_{2,2}(\alpha_{0} + i(\beta_{0} - \beta_{1}))\right)}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} \\ &+ \frac{\sin(3\Psi)\left(\beta_{2,2}\eta(i\alpha_{0} + \beta_{0}) - \beta_{2,2}^{2}\alpha_{1} - i\beta_{1}\eta^{2}\right)}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}}\right]k^{3}. \end{aligned}$$
(5.32)

Como veremos no próximo capítulo, é interessante reescrever o Hamiltoniano (5.29) na forma

$$\mathcal{H}^{eff} = \vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}^{eff}(k), \qquad (5.33)$$

uma vez que esse Hamiltoniano é responsável pela relaxação do spin via um campo magnético efetivo. Sendo assim, obtemos

$$\Omega_0^{eff}(k) = H_{11}^{eff}, (5.34)$$

$$\Omega_x^{eff}(k) = \Omega_x^0(k) + \Omega_x^{\Delta\varepsilon}(k^3) + \Omega_x^{(\Delta\varepsilon)^2}(k^3), \qquad (5.35)$$

$$\Omega_y^{eff}(k) = \Omega_y^0(k) + \Omega_y^{\Delta\varepsilon}(k^3) + \Omega_y^{(\Delta\varepsilon)^2}(k^3), \qquad (5.36)$$

$$\Omega_z^{eff}(k) = 0, \tag{5.37}$$

onde

$$\Omega_{x}^{0}(k) = \left[-\alpha_{0}sin(\Psi) - (\beta_{0} - \beta_{3})cos(\Psi) - \beta_{3}cos(3\Psi)\right]k,$$

$$\Omega_{x}^{\Delta\varepsilon}(k^{3}) = \left[\frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}[sin(\Psi) - sin(3\Psi)]}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})} - \frac{\beta_{2,1}\eta[cos(\Psi) + cos(3\Psi)]}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})}\right]k^{3},$$
(5.39)

$$\Omega_{x}^{(\Delta\varepsilon)^{2}}(k^{3}) = \left[\frac{\sin(\Psi)\left(\eta^{2}(\alpha_{0}-\alpha_{1})+\alpha_{0}\beta_{2,2}^{2}+\beta_{2,2}\eta(\beta_{0}-2\beta_{1})\right)}{(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})^{2}} + \frac{\cos(\Psi)\left(\beta_{2,2}\eta(\alpha_{0}-2\alpha_{1})+\beta_{2,2}^{2}(\beta_{0}-\beta_{1})+\beta_{0}\eta^{2}\right)}{(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})^{2}} + \frac{\cos(3\Psi)(\beta_{1}\eta^{2}-\eta\alpha_{0}\beta_{2,2}}{(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})^{2}} - \frac{\sin(3\Psi)(\alpha_{1}\beta_{2,2}^{2}-\beta_{2,2}\eta\beta_{0})}{(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})^{2}}\right]k^{3}, \quad (5.40)$$

$$\Omega_{y}^{0}(k) = [\alpha_{0}cos(\Psi) + (\beta_{0} - \beta_{3})sin(\Psi) - \beta_{3}sin(3\Psi)]k, \qquad (5.41)$$
  
$$\Omega_{y}^{\Delta\varepsilon}(k^{3}) = \left[-\frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}(cos(\Psi) + cos(3\Psi))}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})} + \frac{\beta_{2,1}\eta(sin(\Psi) - sin(3\Psi))}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})}\right]k^{3}, (5.42)$$

$$\Omega_{y}^{(\Delta\varepsilon)^{2}}(k^{3}) = \left[ -\frac{\cos(\Psi) \left( \eta^{2}(\alpha_{0} - \alpha_{1}) + \alpha_{0}\beta_{2,2}^{2} + \beta_{2,2}\eta(\beta_{0} - 2\beta_{1}) \right)}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} - \frac{\sin(\Psi) \left( \beta_{2,2}\eta(\alpha_{0} - 2\alpha_{1}) + \beta_{2,2}^{2}(\beta_{0} - \beta_{1}) + \beta_{0}\eta^{2} \right)}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} - \frac{\cos(3\Psi)(\alpha_{1}\beta_{2,2}^{2} - \beta_{2,2}\eta\beta_{0})}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} + \frac{\sin(3\Psi)(\beta_{1}\eta^{2} - \alpha_{0}\beta_{2,2}\eta)}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} \right] k^{3}.$$
(5.43)

Para a direção de crescimento [001], este é o Hamiltoniano novo introduzido por nós<sup>1</sup>. Como já dito, este Hamiltoniano 2DEG do poço guântico na primeira subbanda considera a influência via teoria de perturbação da segunda subbanda de mais baixa energia, de modo que se tomarmos as constantes de acoplamento intersubbanda igual à zero, obtemos os Hamiltonianos já conhecidos na literatura.<sup>13, 15, 16</sup>

5.3 Hamiltoniano 
$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right| \mathcal{H}_{2DEG}^{[110]} \left| \vec{k}_{\parallel}, n', \sigma' \right\rangle_{[110]}$$

Nesta seção, iremos encontrar o Hamiltoniano efetivo de um 2DEG confinado na direção [110], para as duas primeiras subbandas. Ou seja, iremos encontrar os elementos de matriz dados por (5.4), utilizando para isso [abc] = [110].

#### Cálculo da contribuição devido à $\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right| \mathcal{H}_{Rashba}^{[110]} \left| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[110]}$ 5.3.1

Utilizando os apêndices B e D, vemos que o Hamiltoniano 8x8 responsável pelo surgimento do Hamiltoniano de Rashba não muda de forma quando rodado. Dessa forma, quando projetamos este Hamiltoniano nas duas subbandas de mais baixa energia, encontraremos novamente

$$\mathcal{H}_{\mathcal{R}}^{[110]} = \begin{pmatrix} 0 & -i\alpha_0 k_- & 0 & -i\eta k_- \\ i\alpha_0 k_+ & 0 & i\eta k_+ & 0 \\ 0 & -i\eta k_- & 0 & -i\alpha_1 k_- \\ i\eta k_+ & 0 & i\alpha_1 k_+ & 0 \end{pmatrix},$$
(5.44)

onde temos agora

$$\alpha_{0} = \langle 0 | \eta^{[110]}(z) | 0 \rangle_{[110]} \quad \alpha_{1} = \langle 1 | \eta^{[110]}(z) | 1 \rangle_{[110]} \quad \eta = \langle 0 | \eta^{[110]}(z) | 1 \rangle_{[110]}.$$
(5.45)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Denis R. Candido, Poliana H. Penteado, J. Carlos Eques, Em preparação

## 5.3.2 Cálculo da contribuição devido à $\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right| \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} \left| \vec{k}_{\parallel}', n', \sigma' \right\rangle_{[110]}$

No entanto, utilizando os apêndices B e C, vemos que o Hamiltoniano de Dresselhaus na direção [110],  $\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]}$ , contém uma diferença, sendo escrito como

$$\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} = \frac{\gamma}{2} \left[ -4k_x k_y k_z \sigma_x + k_z \left( 2k_x^2 - k_z^2 + k_y^2 \right) \sigma_y + k_y \left( 2k_x^2 + k_z^2 - k_y^2 \right) \sigma_z \right].$$
(5.46)

Usaremos as mesmas definições da seção 6.2.2. No entanto, vale apontar aqui que agora temos

$$\beta_{0,j} = \gamma \langle 0 | k_z^j | 0 \rangle_{[110]} \quad \beta_{1,j} = \gamma \langle 1 | k_z^j | 1 \rangle_{[110]} \quad \beta_{2,j} = \gamma \langle 0 | k_z^j | 1 \rangle_{[110]}, \quad (5.47)$$

onde  $k_z = -i\partial_z \in \langle \vec{r} | n \rangle_{[110]} = \varphi_n^{[110]}(z)$ . Calculando então os elementos de projeção para  $\sigma = \sigma'$ , obtemos

$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \right| \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} \left| \vec{k}_{\parallel}, n', \sigma \right\rangle_{[110]} = \left\langle \vec{k}_{\parallel} \right| \vec{k}_{\parallel}^{*} \right\rangle \langle n, \sigma | \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} \left| n', \sigma \right\rangle_{[110]}$$

$$= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \langle n, \sigma | \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} \left| n', \sigma \right\rangle_{[110]}$$

$$= \frac{\gamma}{2} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ -4k_x k_y \overline{\langle \sigma | \sigma_x | \sigma \rangle} \langle n | k_z | n' \rangle_{[110]} \right]$$

$$+ \overline{\langle \sigma | \sigma_y | \sigma \rangle} \left( \langle n | k_z | n' \rangle_{[110]} \left( 2k_x^2 + k_y^2 \right) \delta_{nn'} - \langle n | k_z^3 | n' \rangle_{[110]} \right)$$

$$+ k_y \overline{\langle \sigma | \sigma_z | \sigma \rangle} \left( \left( 2k_x^2 - k_y^2 \right) \delta_{nn'} + \langle n | k_z^2 | n' \rangle_{[110]} \right) \right]$$

$$= \pm \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ \frac{\gamma}{2} k_y \left( 2k_x^2 - k_y^2 \right) \delta_{nn'} + \frac{1}{2} k_y \beta_{i,2} \right], \quad (5.48)$$

enquanto que para  $\sigma \neq \sigma'$ , obtemos

$$\left\langle \vec{k}_{\parallel}, n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} \middle| \vec{k}_{\parallel}, n', \sigma' \right\rangle_{[110]} = \left\langle \vec{k}_{\parallel} \middle| \vec{k}_{\parallel} \right\rangle \langle n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} \left| n', \sigma' \right\rangle_{[110]}$$

$$= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \langle n, \sigma \middle| \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} \left| n', \sigma' \right\rangle_{[110]}$$

$$= \frac{\gamma}{2} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ -4k_x k_y \overline{\langle \sigma \middle| \sigma_x \middle| \sigma' \rangle} \left( \langle n \middle| k_z \middle| n' \rangle_{[110]} \right) \right]$$

$$+ \overline{\langle \sigma \middle| \sigma_y \middle| \sigma' \rangle} \left( \langle n \middle| k_z \middle| n' \rangle_{[110]} \left( 2k_x^2 + k_y^2 \right) - \langle n \middle| k_z^3 \middle| n' \rangle_{[110]} \right) \right]$$

$$+ k_y \overline{\langle \sigma \middle| \sigma_z \middle| \sigma' \rangle} \left( \left( 2k_x^2 - k_y^2 \right) \delta_{nn'} + \langle n \middle| k_z^2 \middle| n' \rangle_{[110]} \right) \right]$$

$$= \frac{1}{2} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ \pm i\beta_{i,3} - 4k_x k_y \beta_{i,1} \pm i \left( 2k_x^2 + k_y^2 \right) \beta_{i,1} \right]$$

$$= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ \pm \frac{i}{2} \beta_{i,3} + \frac{1}{2} \left( -4k_x k_y \pm i \left( 2k_x^2 + k_y^2 \right) \right) \beta_{i,1} \right].$$

$$(5.49)$$

Combinando agora ambos resultados encontramos o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]}$  projetado nas duas primeiras subbandas,

$$\mathcal{H}_{\mathcal{D}}^{[110]} =$$

			Ê
			(5.50
$ \left( 2ik_x k_y - \frac{1}{2} \left( 2k_x^2 + k_y^2 \right) \right) \beta_{2,1} \\ - \frac{1}{2} \beta_{2,3} $	$-rac{1}{2}k_yoldsymbol{\mathcal{B}}_{2,2}$	0	$-\frac{\gamma}{2}k_y\left(2k_x^2-k_y^2\right)\\-\frac{1}{2}k_y\mathcal{B}_1$
$rac{1}{2}k_yeta_{2,2}$	$ \left( 2ik_x k_y + \frac{1}{2} \left( 2k_x^2 + k_y^2 \right) \right) \beta_{2,1} \\ + \frac{1}{2} \beta_{2,3} $	$\frac{\frac{\gamma}{2}k_y}{+\frac{1}{2}k_y\beta_1}\left(2k_x^2-k_y^2\right)$	0
0	$-\frac{\gamma}{2}k_y\left(2k_x^2-k_y^2\right)\\-\frac{1}{2}k_y\mathcal{B}_0$	$ \left( -2ik_x k_y + \frac{1}{2} \left( 2k_x^2 + k_y^2 \right) \right) \beta_{2,1} \\ + \frac{1}{2} \beta_{2,3} $	$-\frac{1}{2}k_y\beta_{2,2}$
$\frac{\frac{y}{2}k_y}{+\frac{1}{2}k_y\mathcal{B}_0}\left(2k_x^2-k_y^2\right)$	0	$rac{1}{2}k_yoldsymbol{\mathcal{B}}_{2,2}$	$ \left( -2ik_x k_y - \frac{1}{2} \left( 2k_x^2 + k_y^2 \right) \right) \beta_{2,1} \\ - \frac{1}{2} \beta_{2,3} $

Onde novamente assumimos

$$\beta_0, \ \beta_1, \ \beta_{2,2} \in \mathbf{R} \tag{5.51}$$

já que  $eta_{i,2} \propto k_z^2$  e redefinimos

$$\beta_{2,m} \to (-i)^m \beta_{2,m} \tag{5.52}$$

(para  $m \neq 2$ ) afim de tratar  $\beta_{2,m}$  agora como um número real, dado por  $\gamma \langle 0 | \partial_z^m | 1 \rangle$ . A definição de  $\beta_3$  segue a mesma,  $\beta_3 = \frac{\gamma}{4}k^2$ . Dessa maneira, obtemos

$$\mathcal{H}_{\mathcal{D}}^{[110]} =$$



Com isso, conseguimos escrever outro dos primeiros resultados novos abordados nessa dissertação: o Hamiltoniano efetivo para 2DEG nas duas subbandas de mais baixa energia, representado pelo Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{2DEG}^{[110]}$  projetado na base (5.2)

$$\mathcal{H}_{2DEG}^{[110]} =$$



### 5.3.3 Hamiltoniano efetivo para a primeira subbanda $|k, 0, \uparrow (\downarrow)\rangle_{[110]}$

Utilizando o mesmo procedimento descrito na Seção 6.1.3, derivaremos o Hamiltoniano efetivo 2x2 sobre a base  $|k, 0, \uparrow\downarrow\rangle_{[110]}$ , levando em conta assim, a contribuição da banda  $|k, 1, \uparrow\downarrow\rangle_{[110]}$ , ou seja

$$\mathcal{H}^{eff} = \vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}^{eff}(k), \tag{5.55}$$

onde

$$\Omega_0 = \varepsilon_0, \tag{5.56}$$

$$\Omega_0^{\Delta\varepsilon} = \frac{\beta_{2,3}}{4(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)}, \tag{5.57}$$

$$\Omega_0(k^2) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \tag{5.58}$$

$$\Omega_0^{\Delta\varepsilon}(k^2) = \left[\frac{8\eta^2 + 6\beta_{2,1}\beta_{2,3} + \beta_{2,2} + (2\beta_{2,1}\beta_{2,3} - \beta_{2,2})\cos(2\Psi)}{8(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)}\right]k^2, \quad (5.59)$$

$$\Omega_{0}^{(\Delta\varepsilon)^{2}}(k^{2}) = \left[\frac{\left((\beta_{0}+\beta_{1})\eta - (\alpha_{0}+\alpha_{1})\beta_{2,2}\right)(\cos(2\Psi)-1)\beta_{2,3}}{4(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})^{2}}\right]k^{2}, \quad (5.60)$$

$$\Omega_x^0(k) = -[\alpha_0 \sin(\Psi)]k, \qquad (5.61)$$

$$\Omega_{x}^{\Delta\varepsilon}(k) = \left[\frac{\beta_{2,2}\beta_{2,3}\sin(\Psi)}{2(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})}\right]k, \qquad (5.62)$$

$$\Omega_x^{(\Delta\varepsilon)^2}(k) = \left[ \frac{(\alpha_0 + \alpha_1) \beta_{2,3} sin(\Psi)}{4 (\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k, \qquad (5.63)$$

$$\Omega_{x}^{\Delta\varepsilon}(k^{3}) = \left[\frac{5\beta_{2,1}\beta_{2,2}sin(\Psi)}{8(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})} + \frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}sin(3\Psi)}{8(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})^{2}}\right]k^{3},$$
(5.64)

$$\Omega_{x}^{(\Delta\varepsilon)^{2}}(k^{3}) = \left[\frac{(10\alpha_{0}+2\alpha_{1})\beta_{2,1}\beta_{2,3}+3(\alpha_{0}+\alpha_{1})\beta_{2,2}^{2}+-6\beta_{1}\beta_{2,2}\eta+16(\alpha_{0}-\alpha_{1})\eta^{2}}{16(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})^{2}}sin(\Psi)\right]$$

+ 
$$\frac{2(\alpha_0 - 3\alpha_1)\beta_{2,1}\beta_{2,3} - (\alpha_0 + \alpha_1)\beta_{2,2}^2 + 2\beta_1\beta_{2,2}\eta}{16(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2}sin(3\Psi)\bigg]k^3,$$
 (5.65)

$$\Omega_y^0(k) = [\alpha_0 \cos(\Psi)]k, \qquad (5.66)$$

$$\Omega_{y}^{(\Delta\varepsilon)^{2}}(k) = \left[-\frac{(\alpha_{0} - \alpha_{1})\beta_{2,3}^{2}}{4(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}}cos(\Psi)\right]k,$$
(5.67)

$$\Omega_{y}^{\Delta\varepsilon}(k^{3}) = \left[\frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}}{2(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})}\cos(\Psi) - \frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}}{2(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})}\cos(3\Psi)\right]k^{3},$$
(5.68)

$$\Omega_{y}^{(\Delta\varepsilon)^{2}}(k^{3}) = \left[ -\frac{2(7\alpha_{0} - 11\alpha_{1})\beta_{2,1}\beta_{2,2} - (\alpha_{0} + \alpha_{1})\beta_{2,2}^{2} - \beta_{1}\beta_{2,2}\eta + 2(\alpha_{1} - \alpha_{2})\eta^{2}}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}}cos(\Psi) - \frac{2(\alpha_{0} + 3\alpha_{1})\beta_{2,1}\beta_{2,3} - (\alpha_{0} + \alpha_{1})\beta_{2,2}^{2} + 2\beta_{1}\beta_{2,2}\eta}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}}cos(3\Psi) \right]k^{3}, \quad (5.69)$$

$$\Omega_{z}^{0}(k) = \left[\frac{1}{2}(\beta_{0} - \beta_{3})\sin(\Psi) + \frac{3}{2}\beta_{3}\sin(3\Psi)\right]k, \qquad (5.70)$$

$$\Omega_{z}^{\Delta\varepsilon}(k) = \left[\frac{\beta_{2,3}\eta}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})}\sin(\Psi)\right]k, \qquad (5.71)$$

$$\Omega_{z}^{(\Delta\varepsilon)^{2}}(k) = \left[-\frac{(\beta_{0} + \beta_{1} - 2\beta_{3})\beta_{2,3}^{2}}{8(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}}sin(\Psi) - \frac{3\beta_{3}\beta_{2,3}^{2}}{4(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}}sin(3\Psi)\right]k,$$
(5.72)

$$\Omega_{z}^{\Delta\varepsilon}(k^{3}) = \left[\frac{\beta_{2,1}\eta}{4(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})}\sin(\Psi) - \frac{3\beta_{2,1}\eta}{4(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})}\sin(3\Psi)\right]k^{3},$$
(5.73)

$$\Omega_{z}^{(\Delta\varepsilon)^{2}}(k^{3}) = \left[-\frac{3(\beta_{0}-\beta_{1})\beta_{2,2}^{2}+10(\beta_{0}+\beta_{1})\beta_{2,1}\beta_{2,3}+16(\beta_{0}+\beta_{1})\eta^{2}-16\alpha_{1}\beta_{2,2}\eta}{32(\varepsilon_{0}-\varepsilon_{1})^{2}}sin(\Psi)\right]$$

+ 
$$\frac{(\beta_0 - \beta_1)\beta_{2,2}^2 - 2(\beta_0 + \beta_1)\beta_{2,1}\beta_{2,3}}{32(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2}sin(3\Psi)\bigg]k^3.$$
 (5.74)

Para a direção de crescimento [110], este é o Hamiltoniano novo introduzido por nós <sup>2</sup>, Hamiltoniano este que recorre aos já conhecidos<sup>9,10,18</sup> quando tomarmos as constantes de acoplamento intersubbanda igual à zero.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Denis R. Candido, Poliana H. Penteado, J. Carlos Egues, Em preparação
### **CAPÍTULO 6**

### MECANISMO DE RELAXAÇÃO DE SPIN VIA D'YAKONOV-PEREL'

Com os avanços da spintrônica, como por exemplo o dispositivo proposto por Datta e Das<sup>1</sup> (transistor de spin), torna-se necessário saber como se dá a dinâmica (também chamada relaxação) de spin do elétron em semiconductores. Com isso, surgem diversos modelos para o estudos dessa dinâmica, como é o caso da relaxação de spin via mecanismo Elliott-Yafet,<sup>12</sup> D'yakonov-Perel'<sup>6</sup> e Bir-Aronov-Pikus e interação hiperfina.<sup>4</sup>

Tratando-se de cristais e heteroestruturas de zincblende sem impurezas magnéticas, temos D'yakonov-Perel' como o principal mecanismo de relaxação de spin.<sup>4,12</sup> O estudo desse mecanimos será explorado nessa dissertação seguindo<sup>4</sup> como principal referência. Também mostraremos ao leitor uma derivação rápida baseada em Mecânica Estatística para o entendimento da origem física desta relaxação.

Dessa maneira, esse será o capítulo que nos mostrará o segundo resultado novo abordado nesta dissertação, as expressões analíticas do tempo de relaxação (via D'yakonov-Perel') para os Hamiltonianos de 2DEGs da primeira sub banda que consideram a influência da segunda.

#### 6.1 D'akonov-Perel'

#### 6.1.1 Descrição do mecanismo e suas principais características

O espalhamento via fônons (vibrações térmicas) e elétrons diminui quando há o decréscimo da temperatura. Sendo assim, trabalharemos em baixas temperaturas a fim de desprezarmos esses espalhamentos. Dessa maneira, iremos abordar somente as colisões com impurezas (não magnéticas) da rede, onde o momento do elétron é alterado, preservando totalmente o seu spin (D'yakonov-Perel').<sup>6</sup>



Figura 6.1 – Representação esquemática da relaxação de spin via mecanismo de D'yakonov-Perel' em um 2DEG. As bolas e flechas vermelhas representam os elétrons e seus respectivos spins. As flechas azuis representam a direção do campo  $\vec{\Omega}(\vec{k})$  e as bolas pretas representam as impurezas, i.e., os centros espalhadores de elétrons.

Em outras palavras, o mecanismo de relaxação aqui não envolve relaxação do spin durante as colisões mas sim entre as diversas colisões, como mostra a Fig. (6.1). Esse mecanismo de relaxação é conhecido como mecanismo de relaxação de D'yakonov-Perel'.<sup>6</sup> Neste, o nosso gás de elétron é tratado como sendo permeado por impurezas espalhadoras e um campo magnético efetivo, obtido via Hamiltonianos efetivos para a banda de condução derivados nos capítulos anteriores, i.e.,

$$\mathcal{H}_{2DEG} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}(\vec{k}).$$
(6.1)

Dessa maneira, sabemos que o spin do elétron vai precessionar ao redor do campo  $\vec{\Omega}(\vec{k})$  de acordo com a equação

$$\frac{d\vec{S}(t)}{dt} = \vec{S} \times \vec{\Omega}(\vec{k}), \tag{6.2}$$

onde  $\vec{\Omega}(\vec{k})$  é a conhecida frequência de Larmor. Sendo assim, o spin do elétron precessiona ao redor de  $\vec{\Omega}(\vec{k})$  com frequência  $|\vec{\Omega}(\vec{k})|$  até este sofrer uma colisão a qual altera seu momento para  $\vec{k'}$ , passando a precessionar ao redor de  $\vec{\Omega}(\vec{k'})$  com uma outra frequência  $|\vec{\Omega}(\vec{k'})|$ . Sabendo que devido as colisões o momento do elétron  $\vec{k}$  muda randomicamente e juntando isto com o fato de que o campo o qual o spin precessiona depende de  $\vec{k}$ , concluímos que a precessão do spin entre entre colisões também ocorrerá de forma randômica. Dessa maneira, após muitas colisões teremos uma precessão randômica do spin que nos leva à relaxação.

Uma estimativa do tempo de relaxação devido a este mecanismo pode ser obtido utilizando uma analogia ao conhecido "random walk" de Mecânica Estatística, onde sabemos que o deslocamento total médio após N passos será de  $L\sqrt{N}$ , onde L é a distâncida de cada passo. Fazendo a analogia para a defasagem total média de spin do elétron temos  $\delta\phi\sqrt{N}$ , onde  $\delta\phi$  representa a defasagem do spin por colisão, grandeza essa dada pela frequência de Larmor  $|\vec{\Omega}|$ , vezes o tempo médio entre uma colisão  $\tau_p$ , o que resulta em  $\delta\phi = |\vec{\Omega}(\vec{k})|\tau_p$ . Dessa maneira, após um tempo t, o elétron sofre um número de colisões  $N = t/\tau_p$ , nos resultando em um defasamento total dado por

$$\Delta\phi(t) = |\vec{\Omega}|\tau_{\rho}\sqrt{\frac{t}{\tau_{\rho}}}.$$
(6.3)

Com isso, para conseguimos obter o tempo de relaxação do spin desse mecanismo basta encontrarmos o tempo tal que  $\Delta \phi(t) \sim 1$ , o que nos resulta em

$$\frac{1}{t_s} \sim |\Omega|^2 \tau_p. \tag{6.4}$$

O objetivo aqui foi mostrar ao leitor a origem física da relaxação de spin via mecanismo de D'yakonov-Perel'. Para isso, utilizamos o fato de que o "random walk" da posição eletrônica leva a um "random walk" dos vetores de onda  $\vec{k}$  e consequentemente a um "random walk" do defasamento de spin, uma vez que  $\delta \phi = \delta \phi(\vec{k})$ . Aplicando os resultados do "random walk" da Mecânica Estatística<sup>54</sup> ao defasamento do spin, obtivemos o tempo de relaxação. Uma derivação mais formal e detalhada será feita nas seções seguintes.

Em contrapartida a esse mecanismo, temos o mecanismo de relaxação Elliott-Yafet<sup>12</sup> onde existe a ocorrência do spin-flip ocorre durante a colisão, i.e., não existe a conservação do momento angular durante a colisão. Esse mecanismo por sua vez será desprezado, uma vez que a probabilidade de ocorrer o spin-flip durante a colisão é muito baixa para as condições utilizadas por nós. Ambos mecanismos possuem diferentes dependências com o tempo de relaxação de momento  $\tau_p$ . Para o mecanismo Elliott-Yafet, quanto maior o número de colisões, mais efetivo será esse mecanismo. Comportamento esse, que não ocorre no mecanismo D'yakonov-Perel'. Mesmo sendo desprezado, o mecanismo de relaxação Elliott-Yafet mostra-se conectado D'yakonov-Perel'.<sup>55</sup>

#### 6.1.2 Equação de Boltzmann

Para uma melhor derivação desse mecanismo, utilizamos a equação de Lorentz (6.5) para a descrição da força sentida pelo pacote de onda junto a equação quântica da velocidade deste (6.6), nos dando assim uma descrição semiclássica do nosso problema.

$$\vec{F} = \hbar \vec{k} = -e\vec{E} - e\vec{v}_{\vec{k}} \times \vec{B}, \qquad (6.5)$$

$$\vec{v}_{\vec{k}} = \frac{\partial \epsilon_{\vec{k}}}{\partial (\hbar \vec{k})}.$$
(6.6)

No entanto, nota-se que até esse ponto, as equações de movimento não levam em conta o spin. Em outras palavras, utilizando as equações acima, não observamos nenhuma dinâmica sobre a parte spinorial da função de onda já que não há nenhuma perturbação que conecta os diferentes spins. Sendo assim, torna-se necessário a inclusão desse grau de liberdade para vermos uma dinâmica. Consequentemente, devemos incluir para cada pacote de onda, uma matriz de densidade de estados 2 × 2 que descreverá o acoplamento

dos nossos estados puros,  $|\uparrow (\downarrow)\rangle$ . Supondo então um Hamiltoniano não dependente do tempo que conecta ambos spins, dado por  $H_k = \vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}(\vec{k})$ , sabema snuncamos que a evolução da matriz densidade do sistema é dada por

$$\rho(t) = e^{-i\frac{H_k}{\hbar}\Delta t}\rho(t-\Delta t)e^{i\frac{H_k}{\hbar}\Delta t},$$
(6.7)

onde  $\Delta t \rightarrow 0$ .

Note que a matriz densidade  $\rho$  deve ter uma dependencia com o tempo, com a posição  $\vec{r}$  e com o vetor de onda  $\vec{k}$ , e portanto  $\rho = \rho \left[\vec{k}(t), \vec{r}(t), t\right]$ . Expandindo as exponenciais para pequenos tempos ( $\Delta t \rightarrow 0$ ) temos

$$\rho\left[\vec{k}(t),\vec{r}(t),t\right] \simeq \left(1-\frac{iH_{k}t}{\hbar}\right)\rho\left[\vec{k}(t-dt),\vec{r}(t-dt),t-dt\right]\left(1+\frac{iH_{k}t}{\hbar}\right)+\mathcal{O}(dt^{2}) \\ \simeq \rho\left[\vec{k}(t-dt),\vec{r}(t-dt),t-dt\right]-\frac{idt}{\hbar}\left[H_{k},\rho\left[\vec{k}(t-dt),\vec{r}(t-dt),t-dt\right]\right],$$
(6.8)

e portanto

$$\frac{\rho\left[\vec{k}(t),\vec{r}(t),t\right] - \rho\left[\vec{k}(t-dt),\vec{r}(t-dt),t-dt\right]}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left[H_k,\rho\left[\vec{k}(t-dt),\vec{r}(t-dt),t-dt\right]\right] \\ \simeq -\frac{i}{\hbar} \left[H_k,\rho\left[\vec{k}(t),\vec{r}(t),t\right]\right], \quad (6.9)$$

equação esta conhecida como equação de Heisenberg. Sabendo que o lado esquerdo da equação acima pode ser escrito como

$$\frac{\rho\left[\vec{k}(t),\vec{r}(t),t\right] - \rho\left[\vec{k}(t-dt),\vec{r}(t-dt),t-dt\right]}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial\rho}{\partial\vec{k}}\frac{\partial\vec{k}}{\partial t} + \frac{\partial\rho}{\partial\vec{r}}\frac{\partial\vec{r}}{\partial t}, \quad (6.10)$$

basta inserirmos esse resutlado em (6.9) para encontramos

$$\frac{\partial \rho \left[\vec{k}(t), \vec{r}(t), t\right]}{\partial t} = -\frac{\partial \rho}{\partial (\hbar \vec{k})} \cdot \vec{F}_{\vec{k}} - \frac{\partial \rho}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} - \frac{i}{\hbar} \left[ H_k, \rho \left[ \vec{k}(t), \vec{r}(t), t \right] \right].$$
(6.11)

Resumindo, sabemos que a equação acima só leva em conta a evolução de cada pacotes

de onda via equações semi-clássicas (equações 6.5 e 6.6) e que a dinâmica do spin se dá restritamente ao Hamiltoniano  $H_k$ . Sendo assim, falta ainda levarmos em conta a evolução da matriz densidade devido a colisões com impurezas da rede, elétrons e fônons, a qual adicionado obtemos a famosa equação de Boltzmann

$$\frac{\partial \rho \left[\vec{k}(t), \vec{r}(t), t\right]}{\partial t} = -\frac{\partial \rho}{\partial (\hbar \vec{k})} \cdot \vec{F} - \frac{\partial \rho}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{v} - \frac{i}{\hbar} \left[ H_k, \rho \left[ \vec{k}(t), \vec{r}(t), t \right] \right] + \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} \right)_{Colisão}.$$
 (6.12)

A fim de não carregarmos uma notação muito grande, nesse momento faremos a seguinte troca de notação  $\rho\left[\vec{k}(t), \vec{r}(t), t\right]_{\sigma\sigma'} \rightarrow \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'}$ .

Definimos agora a probabilidade por tempo (taxa) de um elétron com momento  $\vec{k}$  espalhar para um outro estado com momento  $\vec{k'}$  como sendo  $W_{\vec{k}\vec{k'}}$  (Regra de ouro de Fermi (6.14)). Como já dito, o spin é conservado no espalhamento da maneira que para ser possível o elétron transicionar do estado  $\vec{k}$  para  $\vec{k'}$  devemos ter esse ultimo estado vazio, tornando-se necessário o uso do princípio de Pauli.<sup>34</sup> Projetando então o ultimo termo do lado direito da equação (6.12) em  $|\sigma\rangle$ ,  $|\sigma'\rangle$  encontramos

$$\left(\frac{\partial \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'}}{\partial t}\right)_{Colisão} = \sum_{\vec{k'}} \left[ W_{\vec{k'}\vec{k}}\rho_{\vec{k'}\sigma\sigma'} \left(1 - \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'}\right) - W_{\vec{k}\vec{k'}}\rho_{\vec{k}\sigma\sigma'} \left(1 - \rho_{\vec{k'}\sigma\sigma'}\right) \right], \tag{6.13}$$

onde  $W_{\vec{k}'\vec{k}}$  corresponde à taxa dos elétrons espalhados de  $\vec{k}'$  para  $\vec{k}$ ,  $\rho_{\vec{k}\sigma\sigma'}$  aos estados ocupados como momento  $\vec{k}'$  e  $(1 - \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'})$  aos estados vazios com momento  $\vec{k}$ .

Sendo assim, o primeiro termo do lado direito da equação acima corresponde a variação positiva de  $\rho$  devido aos elétrons com momento  $\vec{k'}$  serem espalhados para estados com momento  $\vec{k}$ . Já o segundo termo do lado direito faz referência a variação negativa de  $\rho$ , o que corresponde aos elétrons com momento  $\vec{k}$  espalhados para estados com momento  $\vec{k'}$ .

#### 6.1.3 Espalhamento elástico

Considerando nosso semiconductor como sendo impuro, sabemos que o gap de energia entre o estado fundamental e o excitado da impureza é da ordem de ~ 1eV o que por sua vez é muito maior que  $k_BT$  (~ 25meV na temperatura ambiente).<sup>34</sup> Sendo assim, os elétrons dificilmente excitarão os elétrons da nossa impureza via colisões, ou em outras palavras, não haverá perda de energia dos elétrons por esse mecanismo de espalhamento, caracterisando assim um espalhamento elástico.

Além desse fato, mesmo supondo que exista a perda de energia por parte de um elétron (e consequentemente a excitação de impurezas), existem poucos níveis eletronicos disponíveis para receber esse elétron que acabou de perder energia, o que também aponta para a dificuldade dessa transferência.

Ainda é possível argumentar que existão algumas impurezas excitadas que transferirão energia para o elétron, levando a uma não conservação da energia. No entanto, a quantidade destas impurezas é muito pouca, devido ao gap de energia entre esses dois primeiros estados desta (excitado ou não) ser da ordem de  $\sim 1 eV$ .

Com esses argumentos, concluimos que a utilização da colisão elástica é bem justificada fisicamente.

Sendo agora  $U(\vec{r})$  o centro espalhador devido a impurezas e considerando somente colisões elásticas, temos via regra de ouro de Fermi

$$W_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \,\delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}) \left| \langle k | U | k' \rangle \right|^2, \tag{6.14}$$

e portanto

$$W_{\vec{k}'\vec{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \,\delta(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_{\vec{k}}) \left| \langle k' | U | k \rangle \right|^2, \tag{6.15}$$

onde utilizando agora a hermiticidade de  $U(\vec{r})$ , ou seja,  $\langle k | U(\vec{r}) | k' \rangle = \langle k' | U(\vec{r}) | k \rangle^*$ , encontramos

$$W_{\vec{k}\vec{k}'} = W_{\vec{k}'\vec{k}}.$$
 (6.16)

Utilizando esse resultado na equação (6.13), obtemos

$$\left(\frac{\partial \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'}}{\partial t}\right)_{Colis\tilde{a}o} = \sum_{k'} \left[ W_{\vec{k}\vec{k'}} \left( \rho_{\vec{k'}\sigma\sigma'} - \rho_{\vec{k'}\sigma\sigma'} \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'} \right) - W_{\vec{k}\vec{k'}} \left( \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'} - \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'} \rho_{\vec{k'}\sigma\sigma'} \right) \right] \\
= \sum_{k'} W_{\vec{k}\vec{k'}} \left[ \rho_{\vec{k'}\sigma\sigma'} - \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'} - \overbrace{\left(\rho_{\vec{k'}\sigma\sigma'} \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'} - \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'} \rho_{\vec{k'}\sigma\sigma'} \right)}^{=0} \right] \\
= \sum_{k'} W_{\vec{k}\vec{k'}} \left( \rho_{\vec{k'}\sigma\sigma'} - \rho_{\vec{k}\sigma\sigma'} \right), \quad (6.17)$$

ou na forma matricial

$$\left(\frac{\partial \rho_{\vec{k}}}{\partial t}\right)_{Colisão} = \sum_{k'} W_{\vec{k}\vec{k}'} \left(\rho_{\vec{k}'} - \rho_{\vec{k}}\right).$$
(6.18)

#### 6.1.4 Equação de Boltzmann com a inclusão de espalhamento elástico

Substituindo a equação (6.18) na equação de Boltzmann (6.12), obtemos uma equação de Boltzmann modificada

$$\frac{\partial \rho_{\vec{k}}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{\vec{k}}}{\partial (\hbar\vec{k})} \cdot \vec{F} + \frac{\partial \rho_{\vec{k}}}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{v} + \frac{i}{\hbar} [H_{\vec{k}}, \rho_{\vec{k}}] = -\sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k}\vec{k}'} \left(\rho_{\vec{k}} - \rho_{\vec{k}'}\right), \qquad (6.19)$$

aonde agora já existe a inclusão do espalhamento elástico. Vamos agora estudar o caso sem a aplicação de um campo externo ( $\vec{F} = \vec{0}$ ) junto à consideração de um sólido homogêneo  $\left(\frac{\partial \rho_{\vec{k}}}{\partial \vec{r}}\right) = 0$ , i.e.,

$$\frac{\partial \rho_{\vec{k}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H_{\vec{k}}, \rho_{\vec{k}}] = -\sum_{k'} W_{\vec{k}\vec{k'}} \left( \rho_{\vec{k}} - \rho_{\vec{k'}} \right).$$
(6.20)

Sendo o espalhamento elástico e a dependência da energia dada por  $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ (onde utilizamos a aproximação da massa efetiva para descrever os elétrons como sendo elétrons livres em um campo spin-órbita), só existe dependência angular dos vetores  $\vec{k}$  e  $\vec{k}'$  já que  $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$ . Isso nos permite então reescrever nossa matriz densidade como uma soma de duas matrizes, onde a primeira é dada pela parte isotrópica e a segunda pela parte anisotrópica, dada pela equação,

$$\rho_{\vec{k}} = \bar{\rho}_k + (\rho'_{\vec{k}}) \tag{6.21}$$

onde para elétrons livres no caso 2D (poço quânticos) e 3D (bulk), temos

$$\bar{\rho}_k^{3D} = \int \frac{d\Omega}{4\pi} \rho_{\vec{k}}^{3D}, \qquad \bar{\rho}_k^{2D} = \int \frac{d\phi}{2\pi} \rho_{\vec{k}}^{2D},$$
(6.22)

e consequentemente

$$(\overline{\rho_{\vec{k}}'})^{3D} = \int \frac{d\Omega}{4\pi} (\rho_{\vec{k}}')^{3D} = 0, \qquad (\overline{\rho_{\vec{k}}'})^{2D} = \int \frac{d\phi}{2\pi} (\rho_{\vec{k}}')^{2D} = 0.$$
(6.23)

(Aqui, vale frisar que quando falamos em isotropia/anisotropia, estamos nos referindo aos angulos dos vetores de onda) Substituindo então a equação (6.21) na equação (6.20) e tirando a média no angulo sólido (caso 3D) ou polar (caso 2D), obtemos

$$\frac{\partial \overline{\left(\bar{\rho}_{k}+\rho_{\vec{k}}^{\prime}\right)}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \overline{\left[H_{\vec{k}},\bar{\rho}_{k}+\rho_{\vec{k}}^{\prime}\right]} = -\sum_{k^{\prime}} W_{\vec{k}\vec{k}^{\prime}} \left(\overline{\rho}_{k}+\rho_{\vec{k}}^{\prime}-\bar{\rho}_{k}-\rho_{\vec{k}^{\prime}}^{\prime}\right) \\
\frac{\partial \bar{\rho}_{k}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \overline{\left[H_{\vec{k}},\bar{\rho}_{k}\right]} + \frac{i}{\hbar} \overline{\left[H_{\vec{k}},\rho_{\vec{k}}^{\prime}\right]} = -\sum_{k^{\prime}} W_{\vec{k}\vec{k}^{\prime}} \left(\bar{\rho}_{k}+\overline{\rho_{\vec{k}}^{\prime}}-\bar{\rho}_{k}-\overline{\rho_{\vec{k}^{\prime}}^{\prime}}\right) \\
\frac{\partial \bar{\rho}_{k}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \overline{\left[H_{\vec{k}},\bar{\rho}_{k}\right]} + \frac{i}{\hbar} \overline{\left[H_{\vec{k}},\rho_{\vec{k}}^{\prime}\right]} = 0.$$
(6.24)

Para os Hamiltonianos spin-órbita usados por nós (Hamiltoniano de Dresselhaus e Rashba), temos  $\overline{H_k} = 0$  devido as potências ímpares em k. Obtemos assim a equação de evolução da parte isotrópica da matriz densidade,

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \overline{\left[ H_{\vec{k}}, \rho'_{\vec{k}} \right]} = 0.$$
(6.25)

É importante notar utilizando a equação acima que se a matriz densidade for totalmente isotróprica, isto é, se  $\rho'_{\vec{k}} = 0$ , não haverá evolução temporal de  $\rho_k$ . Agora, vamos utilizar a equação (6.21) em (6.20), nos dando

$$\frac{\partial \left(\bar{\rho}_{k}+\rho_{\vec{k}}'\right)}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\left[H_{\vec{k}},\bar{\rho}_{k}+\rho_{\vec{k}}'\right] = -\sum_{k'}W_{\vec{k}\vec{k}'}\left(\bar{\rho}_{k}+\rho_{\vec{k}}'-\bar{\rho}_{k}+-\rho_{\vec{k}'}'\right) \\
\frac{\partial \bar{\rho}_{k}}{\partial t}+\frac{\partial \rho_{\vec{k}}'}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\left[H_{\vec{k}},\bar{\rho}_{k}+\rho_{\vec{k}}'\right] = -\sum_{k'}W_{\vec{k}\vec{k}'}\left(\rho_{\vec{k}}'-\rho_{\vec{k}'}'\right).$$
(6.26)

Combinando agora a equação (6.26) com a equação (6.25), obtemos

$$\frac{\partial \rho'_{\vec{k}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left[ H_{\vec{k}}, \bar{\rho}_k + \rho'_{\vec{k}} \right] + \frac{i}{\hbar} \overline{\left[ H_{\vec{k}}, \rho'_{\vec{k}} \right]} = -\sum_{k'} W_{\vec{k}\vec{k'}} \left( \rho'_{\vec{k}} - \rho'_{\vec{k'}} \right), \tag{6.27}$$

equação esta que descreve a evolução temporal da parte anisotrópica da matriz densidade de estado.

#### 6.1.5 Aproximação envolvida na equação (6.27)

Para procedermos com o cálculo do tempo de relaxação devemos fazer uma análise da equação acima.

Consideremos o caso em que não há espalhamento, ou seja,  $t < \tau_p$  onde  $\tau_p$  é o tempo médio entre colisões. Para estes valores de tempo, a não existencia de colisões implica em igualar o lado direito da equação acima igual a zero, ou seja

$$\frac{\partial \rho'_{\vec{k}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H_{\vec{k}}, \bar{\rho}_k] + \frac{i}{\hbar} [H_{\vec{k}}, \rho'_{\vec{k}}] + \frac{i}{\hbar} \overline{\left[H_{\vec{k}}, \rho'_{\vec{k}}\right]} = 0.$$
(6.28)

Sabendo que os Hamiltonianos de ordem n, tratados por nós vem primordialmente da teoria de perturbação de Löwdin aplicada sobre um Hamiltoniano de ordem m, onde m > n, podemos escrever nosso Hamiltoniano de uma forma geral como

$$H_{n \times n}(\vec{k}) = a + \sum_{i=x,y,z} b_i k_i + \sum_{i,j} c_{ij} k_i k_j + \sum_{i,j,m} c_{ijm} k_i k_j k_m + \cdots$$
(6.29)

Reescrevemos nossos Hamiltonianos na forma

$$H_{\vec{k}}^{3D} = \sum_{n,l,m} H_{lm}^{n}(k) = \sum_{n,l,m} A_{lm}^{n} k^{n} Y_{m}^{l}(\theta,\phi),$$
(6.30)

$$H_{\vec{k}}^{2D} = \sum_{n,m} H_m^n(k) = \sum_{n,m} B_{nm} k^n e^{im\phi}, \qquad (6.31)$$

e tomamos os seguinte ansatz para a parte anisotrópica da matriz densidade

$$(\rho'_{\vec{k}})^{3D} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{n,l,m} \tau^{\star}_{l} \left[ H^{n}_{lm}(k), \bar{\rho}^{3D}_{k} \right] \qquad (\rho'_{\vec{k}})^{2D} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{n,m} \tau^{\star}_{m} \left[ H^{n}_{m}(k), \bar{\rho}^{2D}_{k} \right], \quad (6.32)$$

Inserindo agora esse ansatz em (6.28), obtemos

$$\frac{\partial(\rho'_{\vec{k}})^{3D}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left[ H^{3D}_{\vec{k}}, \bar{\rho}^{3D}_{k} \right] + \frac{1}{\hbar^{2}} \left[ H^{3D}_{\vec{k}}, \sum_{n,l,m} \tau^{\star}_{l} \left[ H^{n}_{lm}(k), \bar{\rho}^{3D}_{k} \right] \right] + \frac{1}{\hbar^{2}} \overline{\left[ H^{3D}_{\vec{k}}, \sum_{n,l,m} \tau^{\star}_{l} \left[ H^{n}_{lm}(k), \bar{\rho}^{3D}_{k} \right] \right]} = 0$$

$$\frac{\partial(\rho'_{\vec{k}})^{2D}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left[ H^{2D}_{\vec{k}}, \bar{\rho}^{2D}_{k} \right] + \frac{1}{\hbar^{2}} \left[ H^{2D}_{\vec{k}}, \sum_{n,m} \tau^{\star}_{m} \left[ H^{n}_{m}(k), \bar{\rho}^{2D}_{k} \right] \right] + \frac{1}{\hbar^{2}} \overline{\left[ H^{2D}_{\vec{k}}, \sum_{n,m} \tau^{\star}_{m} \left[ H^{n}_{m}(k), \bar{\rho}^{2D}_{k} \right] \right]} = 0$$

$$(6.33)$$

Mantendo apenas os termos em primeira ordem de  $H_{\vec{k}}$  (nossa perturbação no spin) obtemos

$$\frac{\partial (\rho'_{\vec{k}})^{3D/2D}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left[ H^{3D/2D}_{\vec{k}}, \bar{\rho}^{3D/2D}_{k} \right] = 0, \qquad (6.34)$$

equação esta que nos mostra que a variação da parte anisotrópica da matriz densidade é dependente em primeira ordem em  $H_{\vec{k}}$ .

A partir desse ponto, vale apontar que existe uma grande diferença nos cálculos realizados nessa dissertação para com os realizados em.<sup>4</sup> Isso se deve pois em<sup>4</sup> o autor realiza a dedução do tempo de relaxação de spin utilizando uma ansatz restrito para nosso Hamiltoniano.

Inserindo agora o ansatz (6.31) na equação (6.25) obtemos

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{k}^{3D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^{2}} \overline{\left[H_{\vec{k}}^{3D}, \sum_{n,l,m} \tau_{l}^{\star} \left[H_{lm}^{n}(k), \bar{\rho}_{k}^{3D}\right]\right]} = 0 \qquad \frac{\partial \bar{\rho}_{k}^{2D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^{2}} \overline{\left[H_{\vec{k}}, \sum_{n,m} \tau_{m}^{\star} \left[H_{m}^{n}(k), \bar{\rho}_{k}^{2D}\right]\right]} = 0,$$
(6.35)

onde aqui nota-se que a variação da parte isotrópica da matriz densidade é dependente em segunda ordem em  $H_{\vec{k}}$ .

Sendo  $H_{\vec{k}}$  nossa perturbação, concluimos que a relaxação da parte anisotrópica da matriz densidade se dá de maneira mais rápida quando comparada a relaxação da parte isotrópica.

Considerando então só termos proporcionais a primeira ordem na nossa perturbação  $(H_{\vec{k}})$  e utilizando o argumento de que a parte anisotrópica da matriz densidade relaxa rapidamente, ou seja

$$\underbrace{\frac{\partial \rho'_{\vec{k}}}{\partial t}}_{=} + \frac{i}{\hbar} [H_{\vec{k}}, \bar{\rho}_k] + \underbrace{\frac{\partial P_{\vec{k}}}{\partial t}}_{=} + \underbrace{\frac{\partial P_{\vec{k}}}{\partial t}}_{=} + \underbrace{\frac{\partial P_{\vec{k}}}{\partial t}}_{=} - \sum_{k'} W_{\vec{k}\vec{k'}} \left(\rho'_{\vec{k}} - \rho'_{\vec{k'}}\right).$$
(6.36)

obtemos

$$\frac{i}{\hbar}[H_{\vec{k}},\bar{\rho}_k] = -\sum_{k'} W_{\vec{k}\vec{k'}} \left( \rho'_{\vec{k}} - \rho'_{\vec{k'}} \right).$$
(6.37)

#### 6.1.6 Tempo de relaxação para o caso bulk 3D

Derivada a equação estática (6.37), conseguimos continuar com o cálculo do tempo de relaxação. Nessa subseção, derivaremos o tempo de relaxação para o caso bulk 3D. Para isso, basta lembrarmos que nosso Hamiltoniano pode ser reescrito como

$$H_{\vec{k}}^{3D} = \sum_{n,l,m} H_{lm}^{n}(k) = \sum_{n,l,m} A_{lm}^{n} k^{n} Y_{m}^{l}(\theta,\phi), \qquad (6.38)$$

o qual inserido na equação (6.37) junto com o ansatz descrito por (6.32) nos leva à

$$\sum_{n,l,m} \left\{ k^{n} Y_{m}^{l}(\theta,\phi) \left[ A_{ml}^{n}, \bar{\rho}_{k} \right] - \sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k}\vec{k}'} \tau_{l}^{\star} k^{n} \left( Y_{m}^{l}(\theta,\phi) - Y_{m}^{l}(\theta',\phi') \right) \left[ A_{ml}^{n}, \bar{\rho}_{k} \right] \right\} = 0,$$

$$\sum_{n,l,m} k^{n} \tau_{l}^{\star} \left\{ \frac{Y_{m}^{l}(\theta,\phi)}{\tau_{l}^{\star}} - \sum_{\vec{k}'} W_{\vec{k}\vec{k}'} \left( Y_{m}^{l}(\theta,\phi) - Y_{m}^{l}(\theta',\phi') \right) \right\} \left[ A_{ml}^{n}, \bar{\rho}_{k} \right] = 0,$$
(6.39)

e consequentemente

$$\frac{Y_m^l(\theta,\phi)}{\tau_l^{\star}} = \sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \left( Y_m^l(\theta,\phi) - Y_m^l(\theta',\phi') \right).$$
(6.40)

Para o caso 3D, sabemos que a transformação de um somatório em integral é dada pela relação

$$\sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \dots = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \dots \Delta \vec{k'} \stackrel{\Delta \vec{k'} \to 0}{=} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k'} W(\vec{k}, \vec{k'}) \dots$$
(6.41)

Considerando o caso de espalhamento dependente somente do módulo da diferença do angulo entre os vetores  $\vec{k}$  e  $\vec{k'}$  e substituindo  $W_{\vec{k}\vec{k'}} \rightarrow W(\Psi, k')$ , onde  $\Psi = \arccos\left[\frac{\vec{k}\cdot\vec{k'}}{k^2}\right]$ , obtemos

$$\sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \dots = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k'} W(\Psi, k') \dots$$
(6.42)

Utilizando o argumento descrito na subseção 5.1.3, o termo  $W(\Psi)$  deve conter uma delta do tipo  $\delta(\varepsilon_{\vec{k'}} - \varepsilon_{\vec{k}})$ , onde usando novamente  $\varepsilon_{\vec{k}} \propto k^2$ , obtemos  $\delta(k^2 - k'^2)$  e consequentemente

$$\sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \dots = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k'} \, W(\Psi, k') \dots = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\Omega' \int dk' k'^2 \, W(\Psi, k') \delta(k^2 - k'^2) \dots$$
(6.43)

Utilizando agora a propriedade da delta de Dirac mostrada em,<sup>56</sup> chegamos em

$$\sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \dots = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\Omega' \int dk' k'^2 W(\Psi, k') \left[ \frac{\delta(k-k') + \delta(k+k')}{2k} \right] \dots$$
$$= \frac{V k}{(2\pi)^2} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} W(\Psi, k) \dots$$
(6.44)

Com isso,

$$\frac{Y_m^l(\theta,\phi)}{\tau_l^*} = \frac{V\,k}{(2\pi)^2} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} W(\Psi,k) \left(Y_m^l(\theta,\phi) - Y_m^l(\theta',\phi')\right). \tag{6.45}$$

Utilizando agora a expansão de  $W(\Psi, k)$  em polinomios de Legendre  $P_l(cos\Psi)$ ,

$$W(\Psi, k) = \sum_{l'=0}^{\infty} P_{l'}(cos\Psi)W_{l'},$$
(6.46)

junto a fórmula que relaciona os polinômios de Legendre com os Harmonicos esféricos,

$$P_{l'}(\cos\Psi) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l'}^{l'} Y_m^{l'\star}(\theta',\phi') Y_m^{l'}(\theta,\phi), \qquad (6.47)$$

obtemos

$$\frac{Y_{m}^{l}(\theta,\phi)}{\tau_{l}^{*}} = \frac{Vk}{(2\pi)^{2}} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \left[ \left( \sum_{l'=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2l'+1} \sum_{m'=-l'}^{l'} Y_{m'}^{l'*}(\theta',\phi') Y_{m'}^{l'}(\theta,\phi) \right) W_{l'} \right] \left( Y_{m}^{l}(\theta,\phi) - Y_{m}^{l}(\theta',\phi') \right),$$

$$\frac{Y_{m}^{l}(\theta,\phi)}{\tau_{l}^{*}} = \frac{Vk}{(2\pi)^{2}} \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{W_{l'}}{2l'+1} \left[ Y_{m'}^{l'}(\theta,\phi) Y_{m}^{l}(\theta,\phi) \int d\Omega' Y_{m'}^{l'*}(\theta',\phi') \right)$$

$$- Y_{m'}^{l'}(\theta,\phi) \int d\Omega' Y_{m'}^{l'*}(\theta',\phi') Y_{m}^{l}(\theta',\phi') \right],$$
(6.48)

$$\frac{Y_{m}^{l}(\theta,\phi)}{\tau_{l}^{\star}} = \frac{Vk}{(2\pi)^{2}} \left[ \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{W_{l'}}{2l'+1} Y_{m'}^{l'}(\theta,\phi) Y_{m}^{l}(\theta,\phi) \int d\Omega' Y_{m'}^{l'\star}(\theta',\phi') - \frac{W_{l}}{2l+1} Y_{m}^{l}(\theta,\phi) \right],$$
(6.49)
$$\frac{1}{\tau_{l}^{\star}} = \frac{Vk}{(2\pi)^{2}} \left[ \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{W_{l'}}{2l'+1} Y_{m'}^{l'}(\theta,\phi) \int d\Omega' Y_{m'}^{l'\star}(\theta',\phi') - \frac{W_{l}}{2l+1} \right],$$

$$\frac{1}{\tau_{l}^{\star}} = \frac{Vk}{(2\pi)^{2}} \left[ \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \sum_{l'=0}^{\infty} W_{l'} \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{4\pi}{2l'+1} \sum_{m'=-l'}^{l'} Y_{m'}^{l'}(\theta,\phi) Y_{m'}^{l'\star}(\theta',\phi') - \frac{W_{l}}{2l+1} \right],$$

$$\frac{1}{\tau_{l}^{\star}} = \frac{Vk}{(2\pi)^{2}} \left[ \int \frac{d\Omega'}{4\pi} W(\Psi,k) - \frac{W_{l}}{2l+1} \right].$$
(6.50)

Utilizando o resultado dos coeficientes da expansão dos polinomios de Legendre  $(W_l)$  dado por

$$W_l = \frac{2l+1}{2} \int d(\cos\Psi) W(\Psi, k) P_l(\cos\Psi), \qquad (6.51)$$

encontramos o parâmetro de nosso ansatz,

$$\frac{1}{\tau_l^*(k)} = \int \frac{d(\cos\theta')d\phi'}{4\pi} \tilde{W}(\Psi, k) - \frac{1}{2} \int d(\cos\Psi)\tilde{W}(\Psi, k)P_l(\cos\Psi).$$
(6.52)

onde definimos  $\tilde{W}(\Psi, k) = \frac{V k}{4\pi^2} W(\Psi, k)$ .

No entanto, podemos simplificar ainda mais a expressão de  $\tau_l^*(k)$ . Para isso, basta ver que o resultado da primeira integral na equação (6.52) não deve depender particularmente da orientação do nosso sistema cartesiano (uma vez que a função W é par na variável  $\Psi$ ). Logo, fazemos uma escolha particular do nossos eixos, colocando o vetor  $\vec{k}$  paralelo ao eixo  $\hat{z}$ , o que nos leva à  $\theta = \phi = 0$ . Sabendo que o angulo  $\Psi$  é relacionado aos angulos dos vetores  $\vec{k}$  e  $\vec{k'}$  pela fórmula

$$\cos\Psi = \cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos\left(\phi - \phi'\right), \qquad (6.53)$$

obtemos para  $\theta = \phi = 0$ 

$$\cos\Psi = \cos\theta'. \tag{6.54}$$

Manipulando a equação (6.52), obtemos a expressão analítica para o parâmetro de nosso ansatz (6.32),

$$\frac{1}{\tau_l^*(k)} = \frac{1}{2} \int d(\cos\theta) \tilde{W}(\Psi, k) [1 - P_l(\cos\theta)].$$
(6.55)

Achado o parâmetro  $\tau_l^*(k)$ , sabemos que a solução da equação (6.37) é dada por (6.32). Isso nos leva a um passo final na determinação do tempo de relaxação, resolver a equação (6.25), ou seja

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k^{3D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^2} \overline{\left[ H_{\vec{k}}^{3D}, \sum_{n,l,m} \tau_l^{\star}(k) \left[ H_{lm}^n(k), \bar{\rho}_k^{3D} \right] \right]} = 0.$$
(6.56)

Inserindo a equação (6.38) na equação acima e manipulando-a, obtemos

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{k}^{3D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^{2}} \overline{\left[\sum_{n',l',m'} H_{l'm'}^{n'}(k), \sum_{n,l,m} \tau_{l}^{*}(k) \left[H_{lm}^{n}(k), \bar{\rho}_{k}^{3D}\right]\right]} = 0, \\ \frac{\partial \bar{\rho}_{k}^{3D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{n',l',m'} \sum_{n,l,m} \tau_{l}^{*}(k) \overline{\left[H_{l'm'}^{n'}(k), \left[H_{lm}^{n}(k), \bar{\rho}_{k}^{3D}\right]\right]} = 0, \\ \frac{\partial \bar{\rho}_{k}^{3D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{n',l',m'} \sum_{n,l,m} \tau_{l}^{*}(k) k^{n} k^{n'} \overline{Y_{m}^{l}(\theta, \phi) Y_{m'}^{l'}(\theta, \phi)} \left[A_{l'm'}^{n'}, \left[A_{lm}^{n}, \bar{\rho}_{k}^{3D}\right]\right] = 0.$$
(6.57)

Sabendo que  $Y_m^l( heta,\phi)=(-1)^mY_{-m}^{l\star}( heta,\phi)$ , obtemos

$$\overline{Y_m^l(\theta,\phi)Y_{m'}^{l'}(\theta,\phi)} = \int \frac{d\Omega}{4\pi} Y_m^l(\theta,\phi)Y_{m'}^{l'}(\theta,\phi),$$

$$= (-1)^m \int \frac{d\Omega}{4\pi} Y_m^l(\theta,\phi)Y_{-m'}^{l'\star}(\theta,\phi),$$

$$= \frac{(-1)^{m'}}{4\pi} \delta_{m',-m}^{l,l'}.$$
(6.58)

Equação está que nos permite simplificar a equação (6.57) à

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{k}^{3D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{n',l',m'} \sum_{n,l,m} \tau_{l}^{*} k^{n} k^{n'} \frac{(-1)^{m'}}{4\pi} \delta_{m',-m}^{l,l'} \left[ A_{l'm'}^{n'}(k), \left[ A_{lm}^{n}, \bar{\rho}_{k}^{3D} \right] \right] = 0, 
\frac{\partial \bar{\rho}_{k}^{3D}}{\partial t} + \frac{1}{4\pi\hbar^{2}} \sum_{n,n',l,m} (-1)^{-m} \tau_{l}^{*}(k) k^{n} k^{n'} \left[ A_{l-m}^{n'}(k), \left[ A_{lm}^{n}, \bar{\rho}_{k}^{3D} \right] \right] = 0, 
\frac{\partial \bar{\rho}_{k}^{3D}}{\partial t} + \frac{1}{4\pi\hbar^{2}} \sum_{l,m} (-1)^{m} \tau_{l}^{*}(k) \left[ \sum_{n} k^{n'} A_{l-m}^{n'}, \left[ \sum_{n} k^{n} A_{lm}^{n}, \bar{\rho}_{k}^{3D} \right] \right] = 0. \quad (6.59)$$

Lembrando que

$$H_{\vec{k}}^{3D} = \sum_{n,l,m} A_{lm}^{n} k^{n} Y_{m}^{l}(\theta, \phi),$$
(6.60)

basta multiplicarmos ambos os lados da igualdade por  $Y_{m'}^{l'\star}(\theta,\phi)$  e integrarmos em  $d\Omega$  para obtermos

$$\sum_{n} k^{n} A^{n}_{l'm'} = \int d\Omega H^{3D}_{\vec{k}} Y^{l'\star}_{m'}(\theta, \phi) \equiv H_{l'm'}(k), \qquad (6.61)$$

o que leva a equação (6.59) à

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k^{3D}}{\partial t} + \frac{1}{4\pi\hbar^2} \sum_{l,m} (-1)^m \tau_l^*(k) \left[ H_{l-m}(k), \left[ H_{lm}(k), \bar{\rho}_k^{3D} \right] \right] = 0.$$
(6.62)

Reescrevemos nosso Hamiltoniano na forma  $H^{3D}_{\vec{k}} = \vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}^{3D}_{\vec{k}}$  junto à  $\bar{\rho}^{3D}_k = \vec{\sigma} \cdot \vec{s}^{3D}$  e  $H_{lm}(k) = \vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}_{lm}(k)$ , onde

$$\vec{\Omega}_{lm}(k) = \int d\Omega \,\vec{\Omega}_{\vec{k}}^{3D} Y_m^{l\star}(\theta, \phi).$$
(6.63)

Dessa maneira torna-se possível simplificarmos os comutadores, dados por

$$\left[H_{l-m}(k), \left[H_{lm}(k), \bar{\rho}_{k}^{3D}\right]\right] = \left[\vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}_{l-m}(k), \left[\vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}_{lm}(k), \vec{\sigma} \cdot \vec{s}^{3D}\right]\right],$$
(6.64)

utilizando a conhecida relação  $(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B})$ , obtendo portando

$$\left[\vec{\sigma}\cdot\vec{\Omega}_{lm}(k),\vec{\sigma}\cdot\vec{s}^{3D}\right] = 2i\vec{\sigma}\cdot(\vec{\Omega}_{lm}(k)\times\vec{s}^{3D}),\tag{6.65}$$

e consequentemente

$$\left[\vec{\sigma}\cdot\vec{\Omega}_{l-m}(k),\ 2i\vec{\sigma}\cdot(\vec{\Omega}_{lm}\times\vec{s}^{3D})\right] = -4\vec{\sigma}\cdot\left[\vec{\Omega}_{l-m}(k)\times\left(\vec{\Omega}_{lm}(k)\times\vec{s}^{3D}\right)\right].$$
(6.66)

Usando agora o resultado  $\vec{A} \times \vec{B} \times \vec{C} = \vec{B}(\vec{A} \cdot \vec{C}) - \vec{C}(\vec{A} \cdot \vec{B})$ , obtemos

$$\begin{bmatrix} H_{l-m}(k), [H_{lm}(k), \bar{\rho}_{k}^{3D}] \end{bmatrix} = -4\vec{\sigma} \cdot \begin{bmatrix} \vec{\Omega}_{lm}(k) \left( \vec{\Omega}_{l-m}(k) \cdot \vec{s}^{3D} \right) - \vec{s}^{3D} \left( \vec{\Omega}_{l-m}(k) \cdot \vec{\Omega}_{lm}(k) \right) \end{bmatrix}.$$
(6.67)

Com isso,

$$\vec{\sigma} \cdot \left\{ \frac{\partial \vec{s}^{3D}}{\partial t} - \frac{1}{\pi \hbar^2} \sum_{l,m} (-1)^m \tau_l^*(k) \left[ \vec{\Omega}_{lm}(k) \left( \vec{\Omega}_{l-m}(k) \cdot \vec{s}^{3D} \right) - \vec{s}^{3D} \left( \vec{\Omega}_{l-m}(k) \cdot \vec{\Omega}_{lm}(k) \right) \right] \right\} = 0.$$
(6.68)

Definindo nossa equação como sendo

$$\frac{\partial (\vec{s}^{\,3D})_i}{\partial t} = -\hat{\Gamma}^{3D}_{ij} (\vec{s}^{\,3D})_j, \qquad (6.69)$$

onde  $\hat{\Gamma}^{3D}_{ij}$  é a componente i, j do nosso tensor  $\hat{\Gamma}^{3D}$ , definido por

$$\hat{\Gamma}^{3D} = \begin{bmatrix} \Gamma_{xx}^{3D} & \Gamma_{xy}^{3D} & \Gamma_{xz}^{3D} \\ \Gamma_{yx}^{3D} & \Gamma_{yy}^{3D} & \Gamma_{yz}^{3D} \\ \Gamma_{zx}^{3D} & \Gamma_{yz}^{3D} & \Gamma_{zz}^{3D} \end{bmatrix},$$
(6.70)

obtemos

$$\hat{\Gamma}_{ij}^{3D} = \frac{1}{\pi\hbar^2} \sum_{l,m} (-1)^m \tau_l^*(k) \left[ \left( \vec{\Omega}_{lm}(k) \cdot \vec{\Omega}_{l-m}(k) \right) \delta_{ij} - \left( \vec{\Omega}_{l-m}(k) \right)_i \left( \vec{\Omega}_{lm}(k) \right)_j \right], \quad (6.71)$$

conhecido como tensor da taxa de relaxação de spin. O tensor relaxação de spin é relacionado á taxa de relaxação de spin via equação

$$\tau_{ij} = \frac{1}{\Gamma_{ij}}.\tag{6.72}$$

#### 6.1.7 Tempo de relaxação para o caso de um poço quântico (2D)

Para o caso de um poço quântico (2D), o procedimento é exatemente o mesmo, motivo pelo qual economizaremos nos detalhes. Primeiramente substituimos nosso Hamiltoniano,

$$H_{\vec{k}}^{2D} = \sum_{n,m} H_m^n(k) = \sum_{n,m} B_{nm} k^n e^{im\phi}, \qquad (6.73)$$

junto ao nosso ansatz (6.32) em

$$\frac{i}{\hbar} [H_{\vec{k}}, \bar{\rho}_k] = -\sum_{k'} W_{\vec{k}\vec{k'}} \left( \rho'_{\vec{k}} - \rho'_{\vec{k'}} \right), \qquad (6.74)$$

nos levando à

$$\sum_{l,m} k^{l} \tau_{m}^{\star} e^{im\phi} \left\{ \frac{1}{\tau_{m}^{\star}} - \sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \left( 1 - e^{im(\phi' - \phi)} \right) \right\} [H_{ml}, \bar{\rho}_{k}] = 0,$$
(6.75)

e consequentemente

$$\frac{1}{\tau_m^{\star}} = \sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \left( 1 - e^{im(\phi' - \phi)} \right).$$
(6.76)

Para o caso 2D obtemos

$$\sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \dots = \frac{A}{(2\pi)^2} \sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \dots \Delta \vec{k'} \stackrel{\Delta \vec{k'} \to 0}{=} \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k'} W(\vec{k}, \vec{k'}) \dots,$$
(6.77)

o qual considerando os mesmo argumentos da subseção anterior, nos leva à

$$\sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \dots = \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k'} W(\Psi, k') \dots = \frac{A}{(2\pi)^2} \int d\phi' \int dk' k' W(\Psi, k') \delta(k^2 - k'^2) \dots$$
(6.78)

Utilizando novamente a propriedade da delta de Dirac descrita na equação (6.44), obtemos

$$\sum_{\vec{k'}} W_{\vec{k}\vec{k'}} \dots = \frac{A}{(2\pi)^2} \int d\phi' \int dk' k' W(\Psi, k') \left[ \frac{\delta(k-k') + \delta(k+k')}{2k} \right] \dots,$$
$$= \frac{A}{4\pi} \int \frac{d\phi'}{2\pi} W(\Psi, k) \dots$$
(6.79)

e consequentemente

$$\frac{1}{\tau_m^{\star}} = \frac{A}{4\pi} \int \frac{d\phi'}{2\pi} W(\Psi, k) \left(1 - e^{im(\phi' - \phi)}\right).$$
(6.80)

Fazendo a mesma consideração de que a função W só depende de  $\Psi$  e par em relação ao angulo  $\Psi$ , ou seja, assumindo  $W(\phi' - \phi, k) = W(\phi - \phi', k)$ , conseguimos reescrever a equação (6.80) como

$$\frac{1}{\tau_m^*(k)} = \frac{A}{4\pi} \int \frac{d(\phi' - \phi)}{2\pi} W(\phi' - \phi, k) \left\{ 1 - \cos\left[m(\phi' - \phi)\right] \right\}.$$
 (6.81)

Achado o parâmetro de nosso ansatz, dado por  $\tau_m^{\star}(k)$ , basta resolvermos a equação (6.25), ou seja

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k^{2D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^2} \left[ H_{\vec{k}}, \sum_{n,m} \tau_m^{\star}(k) \left[ H_m^n(k), \bar{\rho}_k^{2D} \right] \right] = 0.$$
(6.82)

Inserindo agora nosso Hamiltoniano (6.73) na equação acima, obtemos

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{k}^{2D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{n',m'} \sum_{n,m} \tau_{m}^{\star}(k) k^{n} k^{n'} \overline{e^{im'\phi} e^{im\phi}} \left[ B_{n'm'}, \left[ B_{nm}, \bar{\rho}_{k}^{2D} \right] \right] = 0,$$
(6.83)

o qual usando a relação

$$\overline{e^{im'\phi}e^{im\phi}} = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} e^{i(m'+m)\phi}$$
$$= \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} e^{i[m'-(-m)]\phi}$$
$$= \delta_{m',-m}, \qquad (6.84)$$

nos leva à

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k^{2D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^2} \sum_m \tau_m^*(k) \left[ \sum_{n'} k^{n'} B_{n'-m}, \left[ \sum_n k^n B_{nm}, \bar{\rho}_k^{2D} \right] \right] = 0.$$
(6.85)

Onde obtemos

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k^{2D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^2} \sum_m \tau_m^*(k) \left[ H_{-m}(k), \left[ H_{m'}(k), \bar{\rho}_k^{2D} \right] \right] = 0, \qquad (6.86)$$

utilizando a relação

$$\sum_{n} k^{n} B_{nm'} = \int \frac{d\phi}{2\pi} H_{\vec{k}}^{2D} e^{-im'\phi} \equiv H_{m'}(k).$$
(6.87)

Sendo assim, a equação da evolução de  $ar{
ho}_k^{2D}$  fica

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{k}^{2D}}{\partial t} + \frac{1}{\hbar^{2}} \sum_{m} \tau_{m}^{\star}(k) \left[ H_{-m}(k), \left[ H_{m'}(k), \bar{\rho}_{k}^{2D} \right] \right] = 0.$$
(6.88)

Vamos agora reescrever nosso Hamiltoniano e nossa matrix densidade isotrópica na forma  $H_{\vec{k}}^{2D} = \vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}_{\vec{k}}^{2D}, \ \bar{\rho}_{k}^{2D} = \vec{\sigma} \cdot \vec{s}^{2D}, \ \text{junto a } H_{m}(k) = \vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}_{m}(k), \ \text{onde}$ 

$$\vec{\Omega}_m(k) = \int \frac{d\phi}{2\pi} \Omega_{\vec{k}}^{2D} e^{-im\phi}.$$
(6.89)

Sendo assim, simplificando os comutadores

$$\left[H_{-m}(k), \left[H_{m}(k), \bar{\rho}_{k}^{2D}\right]\right] = \left[\vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}_{-m}(k), \left[\vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}_{m}(k), \vec{\sigma} \cdot \vec{s}^{2D}\right]\right],$$
(6.90)

utilizando conhecida relação  $(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B})$ , obtemos

$$\left[\vec{\sigma}\cdot\vec{\Omega}_m(k),\vec{\sigma}\cdot\vec{s}^{2D}\right] = 2i\vec{\sigma}\cdot(\vec{\Omega}_m(k)\times\vec{s}^{2D})$$
(6.91)

e consequentemente

$$\left[\vec{\sigma}\cdot\vec{\Omega}_{-m}(k),\ 2i\vec{\sigma}\cdot(\vec{\Omega}_{m}\times\vec{s}^{2D})\right] = -4\vec{\sigma}\cdot\left[\vec{\Omega}_{-m}(k)\times\left(\vec{\Omega}_{m}(k)\times\vec{s}^{2D}\right)\right].$$
(6.92)

Usando agora o resultado  $\vec{A} \times \vec{B} \times \vec{C} = \vec{B}(\vec{A} \cdot \vec{C}) - \vec{C}(\vec{A} \cdot \vec{B})$ , obtemos

$$\begin{bmatrix} H_{-m}(k), \left[ H_{m}(k), \bar{\rho}_{k}^{2D} \right] \end{bmatrix} = -4\vec{\sigma} \cdot \left[ \vec{\Omega}_{m}(k) \left( \vec{\Omega}_{-m}(k) \cdot \vec{s}^{2D} \right) - \vec{s}^{2D} \left( \vec{\Omega}_{-m}(k) \cdot \vec{\Omega}_{m}(k) \right) \right].$$
(6.93)

Com isso,

$$\vec{\sigma} \cdot \left\{ \frac{\partial \vec{s}^{2D}}{\partial t} - \frac{4}{\hbar^2} \sum_{m} \tau_m^*(k) \left[ \vec{\Omega}_m(k) \left( \vec{\Omega}_{-m}(k) \cdot \vec{s}^{2D} \right) - \vec{s}^{2D} \left( \vec{\Omega}_{-m}(k) \cdot \vec{\Omega}_m(k) \right) \right] \right\} = 0 \quad (6.94)$$

Definindo nossa equação como sendo

$$\frac{\partial (\vec{s}^{2D})_i}{\partial t} = -\hat{\Gamma}^{2D}_{ij} (\vec{s}^{2D})_j \tag{6.95}$$

onde  $\hat{\Gamma}_{ij}^{2D}$  é a componente i, j do nosso tensor  $\hat{\Gamma}^{2D}$ , definido por

$$\hat{\Gamma}^{2D} = \begin{bmatrix} \Gamma_{xx}^{2D} & \Gamma_{xy}^{2D} & \Gamma_{xz}^{2D} \\ \Gamma_{yx}^{2D} & \Gamma_{yy}^{2D} & \Gamma_{yz}^{2D} \\ \Gamma_{zx}^{2D} & \Gamma_{zy}^{2D} & \Gamma_{zz}^{2D} \end{bmatrix},$$
(6.96)

obtemos

$$\Gamma_{ij}^{2D} = \frac{4}{\hbar^2} \sum_{m} \tau_m^{\star}(k) \left[ \left( \vec{\Omega}_m(k) \cdot \vec{\Omega}_{-m}(k) \right) \delta_{ij} - \left( \vec{\Omega}_{-m}(k) \right)_i \left( \vec{\Omega}_m(k) \right)_j \right], \quad (6.97)$$

conhecido como tensor da taxa de relaxação de spin. Da mesma forma que no caso 3D, o tensor relaxação de psin é relacionado á taxa de relaxação de spin via

$$\tau_{ij} = \frac{1}{\Gamma_{ij}}.\tag{6.98}$$

## 6.2 Tempo de relaxação de spin para um poço quântico crescido na direção [001]

Nesta seção mostraremos os segundos resultados novos abordados nessa dissertação: O tempo de relaxação de spin via mecanismo D'yakonov-Perel' considerando um 2DEG em um poço quântico [001] na primeira subbanda incluindo perturbativamente a influência da segunda subbanda de mais baixa energia.

Aplicando então a fórmula (6.97) ao Hamiltoniano (5.33), encontramos o novo tensor taxa de relaxação de spin, cujas relação das componentes são dadas por

$$\Gamma_{yz} = \Gamma_{xz} = \Gamma_{zy} = 0, \tag{6.99}$$

$$\Gamma_{xx} = \Gamma_{yy} = \frac{1}{2} \Gamma_{zz}.$$
(6.100)

Devido a simetria desse tensor, convém definirmos  $\Gamma_{\pm}$ , onde

$$\Gamma_{\pm} = \Gamma_{xx} \pm \Gamma_{xy}. \tag{6.101}$$

como mostra.<sup>16</sup> Aqui,  $\Gamma_{\pm}$  corresponde à taxa de relaxação de spin na direção cartesiana [110] e [110]. Dessa maneira, temos como equações para a relaxação de spin

$$\frac{\partial \left(s_x \pm s_y\right)}{\partial t} = -\Gamma_{\pm} \left(s_x \pm s_y\right), \qquad (6.102)$$

e

$$\frac{\partial s_z}{\partial t} = -\Gamma_{zz} s_z. \tag{6.103}$$

As componentes do tensor são dadas por

$$\begin{split} \Gamma_{yx} &= \Gamma_{xy} = \frac{4\tau_{1}}{\hbar^{2}} \alpha_{0} (\beta_{0} - \beta_{3}) k^{2} \\ &+ \frac{4\beta_{2,1}\eta_{T_{1}}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0}}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})} \right] k^{4} \\ &- \frac{4\beta_{2,1}\beta_{2,2}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{0} - \beta_{3} (1 - (\tau_{3}/\tau_{1}))}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})} \right] k^{4} \\ &- \frac{4\eta^{2}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0} (2\beta_{0} - \beta_{3}) - \alpha_{1} (\beta_{0} - \beta_{3})}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{2}} \right] k^{4} \\ &- \frac{4\beta_{2,2}^{2}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0} (2\beta_{0} - \beta_{1} - \beta_{3}) + \alpha_{1}\beta_{3} (\tau_{3}/\tau_{1})}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{2}} \right] k^{4} \\ &- \frac{4\beta_{2,2}\eta_{T_{1}}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0} (\alpha_{0} - 2\alpha_{1}) + \beta_{0}^{2} - \beta_{0} (2\beta_{1} + \beta_{3}(\tau_{3}/\tau_{1}) + \beta_{3}) + 2\beta_{1}\beta_{3}}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{2}} \right] k^{4} \\ &- \frac{4\beta_{2,1}\eta_{2,2}\eta_{T_{1}}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0} (\alpha_{0} - 2\alpha_{1}) + \beta_{0}^{2} - \beta_{0} (2\beta_{1} + \beta_{3}(\tau_{3}/\tau_{1}) + \beta_{3}) + 2\beta_{1}\beta_{3}}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{2}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{4\beta_{2,1}\beta_{2,2}\eta_{T_{1}}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{0} - \beta_{1}}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{2}} \right] k^{6} \\ &- \frac{4\beta_{2,1}\beta_{2,2}\eta_{T_{1}}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{0} - \beta_{1}}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ &- \frac{4\beta_{2,1}\beta_{2,2}\eta_{T_{1}}}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})} \left[ \frac{2\alpha_{1} + (\alpha_{1} - \alpha_{0}) (\tau_{3}/\tau_{1})}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ &- \frac{4\beta_{2,1}\beta_{2,2}\eta_{T_{1}}}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{2\beta_{1} + (\beta_{0} + \beta_{1}) (\tau_{3}/\tau_{1})}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{4\eta^{4}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{0} (\alpha_{0} - \alpha_{1})}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0} (\beta_{0} - \beta_{1})}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0} (\beta_{0} - \beta_{1})}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0} (\beta_{0} (\beta_{1} + \tau_{3}/\tau_{1}) - \beta_{0}\beta_{1} (2 + \tau_{3}/\tau_{1})}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0} (\beta_{0} (\beta_{1} + \tau_{3}/\tau_{1}) - \beta_{0}\beta_{1} + 2\beta_{1}^{2} - \alpha_{0}\alpha_{1} (2 + (\tau_{3}/\tau_{1}))}}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0}^{2} + \beta_{0}^{2} - \beta_{0}\beta_{1} + 2\beta_{1}^{2} - \alpha_{0}\alpha_{1} (2 + (\tau_{3}/\tau_{1}))}{(\epsilon_{0} - \epsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta_{1}}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0} (\beta_{0} (\beta_{1} + \tau_{3}/\tau_{1}) - \beta_{0}\beta_{1} + 2\beta_{1}^{2} - \alpha_{0}\alpha_{1} (2 + (\tau$$

e

$$\begin{split} \Gamma_{zz} &= \frac{4\tau_1}{h^2} \left[ a_0^2 + (\beta_0 - \beta_3)^2 + \beta_3^2(\tau_3/\tau_1) \right] k^2 \\ &= \frac{8\beta_{2,1}\beta_{2,2}\tau_1}{h^2} \left[ \frac{\beta_0 - \beta_3(1 - (\tau_3/\tau_1))}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)} \right] k^4 \\ &+ \frac{8\beta_{2,1}\sigma_1}{h^2} \left[ \frac{\alpha_0^2 + \beta_0(\beta_0 - \beta_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &- \frac{8\beta_{2,2}^2\sigma_1}{h^2} \left[ \frac{\alpha_0^2 - \alpha_0\alpha_1 + \beta_0^2}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{16\beta_{2,2}\eta\tau_1}{h^2} \left[ \frac{\alpha_0(\beta_1 - \beta_0) + \alpha_1\beta_0}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{8\beta_{2,2}^2\beta_3\tau_1}{h^2} \left[ \frac{\beta_0 - \beta_1}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{8\beta_{2,2}\beta_3\tau_1}{h^2} \left[ \frac{\beta_0 - \beta_1(\tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{8\beta_{2,2}\beta_3\tau_1}{h^2} \left[ \frac{\beta_0 - \beta_1(\tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{8\beta_{2,2}\beta_3\tau_1}{h^2} \left[ \frac{\alpha_0(1 + \tau_3/\tau_1) - 2\alpha_1}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^6 \\ &+ \frac{8\beta_{2,1}\beta_{2,2}}{h^2} \left[ \frac{\alpha_1 + \alpha_0(\tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \right] k^6 \\ &+ \frac{8\beta_{2,1}\beta_{2,2}}{h^2} \left[ \frac{\alpha_1 + \alpha_0(\tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \right] k^6 \\ &+ \frac{8\beta_{2,1}\beta_{2,2}}{h^2} \left[ \frac{\alpha_0 + \beta_1 + \beta_0(\tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \right] k^6 \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}^2}{h^2} \left[ \frac{\alpha_0^2 + \alpha_1^2(\tau_3/\tau_1) + (\beta_0 - \beta_1)^2}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \right] k^6 \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}^2}{h^2} \left[ \frac{\alpha_0\beta_0 + 4\alpha_1\beta_1 - 6\alpha_0\beta_1 - 2\alpha_1\beta_0(2 + \tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^6 \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta^3}{h^2} \left[ \frac{4\alpha_0\beta_0 + 4\alpha_1\beta_1 - 6\alpha_0\beta_1 - 2\alpha_1\beta_0(2 + \tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^6 \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta^2}{h^2} \left[ \frac{4\alpha_0\beta_0 + 4\alpha_1\beta_1 - 6\alpha_0\beta_1 - 2\alpha_1\beta_0(2 + \tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^6 \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta^2}{h^2} \left[ \frac{4\alpha_0\beta_0 + 4\alpha_1\beta_1 - 6\alpha_0\beta_1 - 2\alpha_1\beta_0(2 + \tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^6 \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta^2}{h^2} \left[ \frac{4\alpha_0\beta_0 + 4\alpha_1\beta_1 - 6\alpha_0\beta_1 - 2\alpha_0\beta_1(2 + \tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^6 \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}^2\eta^2}{h^2} \left[ \frac{4\alpha_0\beta_0 + 4\alpha_1\beta_1 - 6\alpha_0\beta_1 - 2\alpha_0\beta_1(2 + \tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^6 \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta^2}{h^2} \left[ \frac{4\alpha_0\beta_0 + 4\alpha_1\beta_1 - 6\alpha_0\alpha_1 + \beta_0\beta_1) + 3\alpha_0^2 + \beta_0^2 (1 + \tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^6 \\ &+ \frac{4\beta_{2,2}\eta^2}{h^2} \left[ \frac{4\alpha_0\beta_0 + 4\alpha_1\beta_1 - 6\alpha_0\alpha_1 + \beta_0\beta_1) + 3\alpha_0^2 + \beta_0^2 (1 + \tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^6 \\ &+ \frac{6100}{h^2} \left[ \frac{4\alpha_0\beta_0 + 4\alpha_1\beta_1 - 6\alpha_0\alpha_1 + \beta_0\beta_1) + 3\alpha_0^2 + \beta_0^2 (1 + \tau_3/\tau_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^6 \\ &+ \frac{6100}{h^2} \left[ \frac{4\alpha_0\beta_0 + 4\alpha_1\beta_1 - 6\alpha_0\alpha$$

#### 6.2.0.1 Comparação com trabalhos conhecidos [001]

Muitos trabalhos calculam o tempo de relaxação de spin para um poço quântico crescido na direção [001].<sup>13,15–17</sup> No entanto, esses trabalhos calculam os tempos de relaxação de spin para os Hamiltonianos  $\mathcal{H}_{Rashba}^{[001]}$  e  $\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]}$  projetados apenas na primeira subbanda de  $\mathcal{H}_{QW}^{[001]}$ . Onde apenas<sup>17</sup> considera o termo cúbico provindo de  $\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]}$ .

Nesse aspecto, esse trabalho contém resultados novos na literatura. Uma vez que nosso Hamiltoniano efetivo (5.33) sobre a primeira subbanda  $|k, 0, \uparrow (\downarrow)\rangle_{[001]}$  leva em conta a influência da segunda subbanda via teoria de perturbação de Löwdin até  $\mathcal{O}(k^3)$ .

Sendo assim, para compararmos nossos resultados com os conhecidos na literatura devemos desacoplarmos as duas primeiras subbandas. Dessa maneira, devemos tomar os parâmetros do subbespaço  $|k, 0, \sigma\rangle\langle k, 1, \sigma'|$  como sendo zero. Ou seja,

$$\eta = \beta_{2,1} = \beta_{2,2} = 0, \tag{6.106}$$

o que simplifica nossos tensores à

$$\Gamma_{yx} = \Gamma_{xy} = \frac{4\alpha_0 \tau_1}{\hbar^2} \alpha_0 \left(\beta_0 - \beta_3\right) k^2,$$
(6.107)

$$\Gamma_{xx} = \Gamma_{yy} = \frac{1}{2}\Gamma_{zz} = \frac{2\tau_1}{\hbar^2} \left[ \alpha_0^2 + (\beta_0 - \beta_3)^2 + \beta_3^2(\tau_3/\tau_1) \right] k^2.$$
(6.108)

Calculando  $\Gamma_{\pm}$  via equação (6.103), obtemos

$$\Gamma_{+} = \frac{2\tau_1 k^2}{\hbar^2} \left[ \alpha_0 + (\beta_0 - \beta_3) \right]^2 + \frac{2\beta_3^2 \tau_3 k^2}{\hbar^2}, \tag{6.109}$$

e

$$\Gamma_{-} = \frac{2\tau_1 k^2}{\hbar^2} [\alpha_0 - (\beta_0 - \beta_3)]^2 + \frac{2\beta_3^2 \tau_3 k^2}{\hbar^2}.$$
 (6.110)

Como podemos ver facilmente consultando a Tab. (6.1), esse resultado está de acordo com as referências,<sup>17,57</sup> se tomarmos  $\tau_1 = \tau_3$ . Para obtermos agora o resultado das refe-

Tabela 6.1 – Tabela comparando as taxas de relaxação  $\Gamma_{zz}$  e  $\Gamma_{\pm}$  obtidos usando nosso modelo sem acoplamento intersubbanda com os tempos de outras referências.

	13, 15, 16	17,57	Resultados simplificados
Γ <sub>zz</sub>	$\frac{4\tau_1k^2}{\hbar^2}\left[\alpha_0^2+\beta_0^2\right]$	$\frac{4\tau_1k^2}{\hbar^2}\left[\alpha_0^2+\left(\beta_0-\beta_3\right)^2+\beta_3^2\right]$	$\frac{4\tau_1k^2}{\hbar}\left[\alpha_0^2+\left(\beta_0-\beta_3\right)^2+\beta_3^2(\tau_3/\tau_1)\right]$
Γ <sub>+</sub>	$\frac{2\tau_1k^2}{\hbar^2}[\alpha_0+\beta_0]^2$	$\tfrac{2\tau_1k^2}{\hbar^2}[\alpha_0+(\beta_0-\beta_3)]^2$	$\frac{2\tau_{1}k^{2}}{\hbar^{2}}[\alpha_{0}+(\beta_{0}-\beta_{3})]^{2}+\frac{2\beta_{3}^{2}\tau_{3}k^{2}}{\hbar^{2}}$
Γ_	$\tfrac{2\tau_1k^2}{\hbar^2}\left[\alpha_0-\beta_0\right]^2$	$\tfrac{2\tau_1k^2}{\hbar^2}\left[\alpha_0-(\beta_0-\beta_3)\right]^2$	$\frac{2\tau_{1}k^{2}}{\hbar^{2}}[\alpha_{0}-(\beta_{0}-\beta_{3})]^{2}+\frac{2\beta_{3}^{2}\tau_{3}k^{2}}{\hbar^{2}}$

rências<sup>13,15,16</sup> não devemos incluir o termo cúbico de dresselhaus, correspondendo assim à

$$\beta_3 = 0.$$
 (6.111)

Nota-se olhando as referências,<sup>13,15–17,57</sup> que as expressões não são exatamentes as mesmas dada pela Tab. (6.1). Isso se deve a dois motivos, o primeiro é devido a notação diferente e o segundo devido à alguns artigos fazerem o cálculo a uma temperatura diferente de 0, caso este que é considerado aqui.

# 6.3 Tempo de relaxação de spin em um QW crescido na direção [110]

Nesta seção mostraremos os segundos resultados novos abordados nessa dissertação: O tempo de relaxação de spin via mecanismo D'yakonov-Perel' considerando um 2DEG em um poço quântico [001] na primeira subbanda incluindo perturbativamente a influência da segunda subbanda de mais baixa energia.

Aplicando então a fórmula (6.97) ao Hamiltoniano (5.55), encontramos o tensor taxa de relaxação de spin, cujas relação das componentes são dadas por

$$\Gamma_{xy} = \Gamma_{yx} = \Gamma_{yz} = \Gamma_{zy} = 0. \tag{6.112}$$

Dessa maneira, temos como equações para a relaxação de spin

#### 134CAPÍTULO 6. MECANISMO DE RELAXAÇÃO DE SPIN VIA D'YAKONOV-PEREL'

$$\frac{\partial s_y}{\partial t} = -\Gamma_{yy} s_y, \tag{6.113}$$

e

$$\frac{\partial s_x}{\partial t} = -\Gamma_{xx}s_x - \Gamma_{xz}s_z,$$

$$\frac{\partial s_z}{\partial t} = -\Gamma_{xz}s_x - \Gamma_{zz}s_z$$
(6.114)

As componentes do tensor são dadas por

$$\begin{split} \Gamma_{xx} &= \frac{r_1}{2h^2} \Big[ 4\alpha_0^2 + (\beta_0 - \beta_3)^2 + 9\beta_3^2(\tau_3/\tau_1) \Big] k^2 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{2(\beta_0 - \beta_3)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)} \Big] k^2 \\ &- \frac{\beta_{2,3}^2\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4\alpha_0(\alpha_0 - \alpha_1) + (\beta_0 - \beta_3)(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3) + 18\beta_3^2(\tau_3/\tau_1)}{4(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^2 \\ &- \frac{2\eta^2\beta_{2,3}^2\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)}{(2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^2 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}^2\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + (\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)^2 + 36\beta_3^2(\tau_3/\tau_1)}{32(\epsilon_0 - \epsilon_1)^4} \Big] k^2 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,1}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{\beta_0 - \beta_3(1 + \tau_3/\tau_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,1}\rho_2\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{2\alpha_0(\alpha_0 - \alpha_1) - 4(\beta_0 - \beta_1)(\beta_1 + \beta_3) + 3(\beta_0 - \beta_1)\beta_3(\tau_3/\tau_1)}{16(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &- \frac{\eta^2\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{\alpha_0(\alpha_0 - \alpha_1) - 4(\beta_0 - \beta_1)(\beta_1 + \beta_3) + 3(\beta_0 - \beta_1)\beta_3(\tau_3/\tau_1)}{16(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &- \frac{\eta\beta_{2,2}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{\alpha_0(7\alpha_0 - 11\alpha_1) + 5(\beta_0 + \beta_1)(\beta_1 - \beta_3) - 3(\beta_0 + \beta_1)\beta_3(\tau_3/\tau_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &- \frac{\eta^2\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{3(\beta_0 - \beta_1)}{8(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta^2\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{3(\beta_0 - \beta_1)}{8(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta^2\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{10(\beta_0 + \beta_1) + (\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3) - 18\beta_3^2(\tau_3/\tau_1)}{8(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\beta_0 + \beta_1)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\beta_0 + \beta_1)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\beta_0 - \beta_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\beta_0 - \beta_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\beta_0 - \beta_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\beta_0 - \beta_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\beta_0 - \beta_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\beta_0 - \beta_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\beta_0 - \beta_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\alpha_0 - \alpha_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\alpha_0 - \alpha_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{h^2} \Big[ \frac{4(\alpha_0 - \alpha_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)$$

$$\begin{array}{l} + \frac{g \beta_{2,3}^{2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{(a_{0}^{2} - a_{1}^{2}) + 16 (\beta_{0} + \beta_{1} - 2\beta_{3})}{16 (c_{0} - c_{1})^{4}} \right] k^{4} \\ & - \frac{g \beta_{2,3} \beta_{2,3}^{2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{(a_{0} - a_{1}) \beta_{1} + 4a_{1} (\beta_{0} + \beta_{1} - 2\beta_{3})}{8 (c_{0} - c_{1})^{2}} \right] k^{4} \\ & + \frac{g_{2,2} \beta_{2,3}^{2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{1 + (g_{1} - a_{1}^{2}) + 36 (a_{0} - a_{1})^{2} + 5 (\beta_{0} + \beta_{1}) (\beta_{0} + \beta_{1} - 2\beta_{3}) + 6 (\beta_{0} + \beta_{1}) \beta_{3} (\tau_{3} / \tau_{1})}{16 (c_{0} - c_{1})^{4}} \right] k^{4} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,1}^{2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{1 + 9 (\tau_{3} / \tau_{1})}{8 (c_{0} - c_{1})^{2}} \right] k^{6} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{1 + (\tau_{1} / \tau_{1})}{2 (c_{0} - c_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{(a_{0} + a_{1}) (1 + \tau_{3} / \tau_{1})}{12 (c_{0} - c_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{4 (a_{0} + a_{1})^{2} (1 + \tau_{3} / \tau_{1}) + (\beta_{0} - \beta_{1})^{2} (9 + \tau_{3} / \tau_{1})}{12 (c_{0} - c_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{4 (a_{0} + a_{1})^{2} (1 + \tau_{3} / \tau_{1}) + (\beta_{0} - \beta_{1})^{2} (9 + \tau_{3} / \tau_{1})}{12 (c_{0} - c_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{(a_{0} + a_{1}) (1 + \tau_{3} / \tau_{1})}{12 (c_{0} - c_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{(a_{0} + a_{1}) (1 + \tau_{3} / \tau_{1})}{32 (c_{0} - c_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{(a_{0} - a_{1}) (1 + \tau_{3} / \tau_{1})}{32 (c_{0} - c_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{(\beta_{0} - 11\beta_{1}) (1 + \tau_{3} / \tau_{1})}{32 (c_{0} - c_{1})^{2}} \right] k^{6} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,2} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{\beta_{1} (a_{0} - a_{1}) - 6 (\beta_{0} + \beta_{1})}{32 (c_{0} - c_{1})^{2}} \right] k^{6} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,2} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{(\beta_{0} - \beta_{1}) (1 - (\beta_{0} + \beta_{1})}{32 (c_{0} - c_{1})^{2}} \right] k^{6} \\ & + \frac{g^{2} \beta_{2,1} \beta_{2,2} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{\beta_{1} (a_{0} - a_{1}) - (a_{0} + 3a_{1}) (\tau_{3} / \tau_{1})}{4 (c_{0} - c_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ & - \frac{g^{2} \beta_{2,1} \beta_{2,2} \beta_{2,2} \tau_{1}}{h^{2}} \left[ \frac{(a_{0} - a_{1}) (7a_{0}$$

$$- \frac{\eta \beta_{2,1} \beta_{2,2} \beta_{2,3} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{7 \beta_0 (\alpha_0 + \alpha_1) + \beta_1 (\alpha_0 + 3\alpha_1) (\tau_3 / \tau_1) + 2\alpha_1 (10\beta_0 + \beta_1)}{16 (\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^6 + \frac{\beta_{2,1}^2 \beta_{2,3}^2 \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{8 (7\alpha_0 - 11\alpha_1)^2 + (\beta_0 + \beta_1)^2 (25 + \tau_3 / \tau_1)}{128 (\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^6$$
(6.115)

$$\begin{split} \Gamma_{uy} &= \frac{\tau_1}{2\hbar^2} \Big[ 4a_0^2 + (\beta_0 - \beta_3)^2 + 9\beta_3^2(\tau_3/\tau_1) \Big] k^2 \\ &= \frac{\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{2(\beta_0 - \beta_3)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)} \Big] k^2 \\ &= \frac{\eta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{2(\beta_0 - \beta_3)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)} \Big] k^2 \\ &= \frac{\beta_{2,2}^2 g_{2,3}^2 \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{4\alpha_1(\alpha_0 + \alpha_1) + (\beta_0 - \beta_3)(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3) + 18\beta_3^2(\tau_3/\tau_1)}{4(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \Big] k^2 \\ &+ \frac{\beta_{2,2}^2 \beta_{2,3}^2 \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{1}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \Big] k^2 \\ &+ \frac{\eta_{2,2}^2 \beta_{2,3}^2 \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{2(\alpha_0 + \alpha_1)}{2(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \Big] k^2 \\ &+ \frac{\eta_{2,3}^2 \eta_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)}{2(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \Big] k^2 \\ &+ \frac{\eta_{2,2}^2 \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{4(\alpha_0 + \alpha_1)^2 + (\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)^2 + 36\beta_3^2(\tau_3/\tau_1)}{32(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \Big] k^2 \\ &- \frac{\beta_{2,2}^2 \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{4(\alpha_0 + \alpha_1)^2 + (\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)^2 + 36\beta_3^2(\tau_3/\tau_1)}{32(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \Big] k^4 \\ &- \frac{\eta_{2,1}^2 \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{4\alpha_0(\alpha_0 + \alpha_1) + \frac{3}{16}(\beta_0 - \beta_1)(\beta_0 - \beta_3)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)} \Big] k^4 \\ &- \frac{\eta_{2,1}^2 \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{3\alpha_0\beta_1 + 4\alpha_1(\beta_0 - \beta_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &- \frac{\eta_{2,2}^2 \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{3\alpha_0\beta_1 + 4\alpha_1(\beta_0 - \beta_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \Big] k^4 \\ &+ \frac{\eta_{2,3}^2 \eta_2 \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{1 + 9(\tau_3/\tau_1)}{2(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \Big] k^6 \\ &+ \frac{\eta_{2,1}^2 \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{(\beta_0 + \beta_1)}{2(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \Big] k^6 \\ &+ \frac{\eta_{2,1}^2 \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{(\alpha_0 + \alpha_1)(1 + \tau_3/\tau_1)}{32(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \Big] k^6 \\ &+ \frac{\eta_{2,1}^2 \eta_2 \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + 128(\beta_0 + \beta_1)^2}{12(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \Big] k^6 \\ &+ \frac{\eta_{2,1}^2 \tau_1}{\hbar^2} \Big[ \frac{4(\alpha_0 - \alpha_1)^2(1 + \tau_3/\tau_1)}{512(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \Big] k^6 \end{aligned}$$

$$\begin{array}{l} + \frac{\eta^2 \beta_{2,2}^2 \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(a_0^2 + 127 a_1^2) + 12\beta_0^2 - 2\beta_1^2 (5 - \tau_3/\tau_1)}{64(c_0 - c_1)^4} \right] k^5 \\ + \frac{\eta \beta_{2,1}^2 r_1}{\hbar^2} \left[ \frac{\beta_1(c_0 + a_1)(1 + \tau_3/\tau_1) + 12a_1(\beta_0 - \beta_1)}{32(c_0 - c_1)^4} \right] k^5 \\ + \frac{\eta \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(3\beta_0 - 11\beta_1)(1 + \tau_3/\tau_1)}{32(c_0 - c_1)^2} \right] k^6 \\ + \frac{\eta^2 \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{\beta_1(a_0 - a_0) - 64(\beta_0 + \beta_1)}{32(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\eta \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{\beta_1(a_0 - a_1) - 64(\beta_0 + \beta_1)}{32(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\eta \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - a_1) - (\alpha_0 + 3\alpha_1)(\tau_3/\tau_1)}{4(c_0 - c_1)^3} \right] k^6 \\ + \frac{\eta \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - a_1)(7a_0 - 11a_1) + 20(\beta_0 + \beta_1)^2}{32(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ - \frac{\beta_{2,1} \beta_{2,2} \sigma_{2,3} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - a_1)(7a_0 - 11a_1) + 20(\beta_0 + \beta_1)^2}{32(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ - \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{2,3} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0^2 - \alpha_1^2) + 16(\beta_0 + \beta_1)(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)}{16(c_0 - c_1)^4} \right] k^4 \\ - \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{2,3} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)\beta_1 + 4\alpha_1(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)}{8(c_0 - c_1)^4} \right] k^4 \\ + \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{3,1}^2 \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)\beta_1 + 4\alpha_1(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)}{8(c_0 - c_1)^2} \right] k^4 \\ + \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{3,1}^2 \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)\beta_1 + 4\alpha_1(\beta_0 - \alpha_1)^2 + 5(\beta_0 + \beta_1)(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3) + 6(\beta_0 + \beta_1)\beta_3(\tau_3/\tau_1)}{16(c_0 - c_1)^4} \right] k^4 \\ + \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{3,1}^2 \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)(1 + \tau_1/\tau_1)}{2(c_0 - c_1)^2} \right] k^6 \\ + \frac{\theta \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)(1 + \tau_1/\tau_1)}{32(c_0 - c_1)^2} \right] k^6 \\ + \frac{\theta \beta_{2,2} \beta_{3,2}^2 \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)(1 + \tau_1/\tau_1)}{32(c_0 - c_1)^3} \right] k^6 \\ + \frac{\theta \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + 128(\beta_0 + \beta_1)^2}{128(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\theta \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + 128(\beta_0 + \beta_1)^2}{128(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\theta \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + 128(\beta_0 - \beta_1)^2}{128(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\theta \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + 128(\beta_0 - \beta_1)^2}{128(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\theta \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + 128(\beta_0 - \beta_1)^2}{128(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\theta \beta_{2,2$$

$$+ \frac{\eta \beta_{2,2}^{2} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{1} (\alpha_{0} + \alpha_{1}) (1 + \tau_{3}/\tau_{1}) + 12\alpha_{1} (\beta_{0} - \beta_{1})}{32 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} + \frac{\eta \beta_{2,1} \beta_{2,2}^{2} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(3\beta_{0} - 11\beta_{1}) (1 + \tau_{3}/\tau_{1})}{32 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} \right] k^{6} + \frac{\eta^{2} \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(\alpha_{0} - 9\alpha_{1})}{8 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} \right] k^{6} + \frac{\eta^{3} \beta_{2,2} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{1} (\alpha_{0} - \alpha_{1}) - 64 (\beta_{0} + \beta_{1})}{32 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} + \frac{\eta \beta_{2,1}^{2} \beta_{2,2} \sigma_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(\beta_{0} + \beta_{1}) (5 - 3(\tau_{3}/\tau_{1}))}{16 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} + \frac{\eta \beta_{2,1}^{2} \beta_{2,2} \beta_{2,3} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(7\alpha_{0} - 11\alpha_{1}) - (\alpha_{0} + 3\alpha_{1}) (\tau_{3}/\tau_{1})}{4 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} + \frac{\eta^{2} \beta_{2,1} \beta_{2,3} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(\alpha_{0} - \alpha_{1}) (7\alpha_{0} - 11\alpha_{1}) + 20 (\beta_{0} + \beta_{1})^{2}}{32 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} - \frac{\beta_{2,1} \beta_{2,2}^{2} \beta_{2,3} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{4 (\alpha_{0} + \alpha_{1}) (7\alpha_{0} - 11\alpha_{1}) + 4 (\alpha_{0} + \alpha_{1}) (\alpha_{0} + 3\alpha_{1}) \frac{\tau_{3}}{\tau_{1}} - (\beta_{0}^{2} - \beta_{1}^{2}) \left(15 + \frac{\tau_{3}}{\tau_{1}}\right)}{144 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6}$$
(6.116)

$$\begin{split} \Gamma_{zz} &= \frac{4\alpha_0^2\tau_1k^2}{\hbar^2} \\ &= \frac{\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{2\alpha_0}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^2 \\ &= \frac{\beta_{2,2}^2\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{1}{2(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^2 \\ &+ \frac{\beta_{2,2}^2\beta_{2,3}^2\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 + \alpha_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \right] k^2 \\ &+ \frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{\alpha_0}{4(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^2 \\ &- \frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{2\alpha_0\beta_1}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,2}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{2\alpha_0\beta_1}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &- \frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(24\alpha_0^2 - 20\alpha_0\alpha_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &- \frac{\beta_{2,1}\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(24\alpha_0^2 - 20\alpha_0\alpha_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{3(\alpha_0 + \alpha_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \right] k^4 \\ &+ \frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{3(\alpha_0 - \alpha_1)}{(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta^2\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{3(\alpha_0 - \alpha_1)}{8(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^3} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta^2\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(2\alpha_0^2 + 3\alpha_0\alpha_1 + \alpha_1)}{8(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta^2\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(2\alpha_0 + \alpha_1)\beta_1}{4(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta^2\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(2\alpha_0^2 + 3\alpha_0\alpha_1 + \alpha_1)}{8(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta^2\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(17\alpha_0^2 - 2\alpha_0\alpha_1 - 15\alpha_1^2)}{16(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta^2\beta_{2,3}\beta_{2,3}\tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{3(\alpha_0^2 - \alpha_0\alpha_1 + \alpha_1^2)}{2(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)^4} \right] k^4 \end{split}$$

$$\begin{split} &+ \frac{\beta_{2,2}^{4}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{5(\alpha_{0} + \alpha_{1})^{2}}{64(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &- \frac{\eta \beta_{2,2}^{3}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{5(\alpha_{0} + \alpha_{1})\beta_{1}}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta^{2}\beta_{2,2}^{2}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(49\alpha_{0}^{2} - 49\alpha_{1}^{2} + 20\beta_{1}^{2})}{64(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &- \frac{\eta^{3}\beta_{2,2}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{49(\alpha_{0} - \alpha_{1})\beta_{1}}{32(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta^{4}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{257(\alpha_{0} - \alpha_{1})^{2}}{128(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta^{2}\beta_{2,1}\beta_{2,2}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{11(\alpha_{0} + \alpha_{1})}{32(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ &- \frac{\eta\beta_{2,1}\beta_{2,2}^{2}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{11\beta_{1}}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta^{2}\beta_{2,1}\beta_{2,2}\eta_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(3\alpha_{0} - 49\alpha_{1})}{(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(11\alpha_{0}^{2} + 7\alpha_{0}\alpha_{1} - 4\alpha_{1}^{2})}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta^{2}\beta_{2,1}\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(37\alpha_{0}^{2} - 82\alpha_{0}\alpha_{1} - 5\alpha_{1}^{2})}{32(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta^{2}\beta_{2,1}\beta_{2,2}\tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(37\alpha_{0}^{2} - 72\alpha_{0}\alpha_{1} + 61\alpha_{1}^{2})}{32(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}^{2}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{17}{32(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,1}\beta_{2,2}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{5(\alpha_{0} + \alpha_{1})}{32(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,1}\beta_{2,2}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{5\beta_{1}}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,1}\beta_{2,2}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{1}(\alpha_{0} + \alpha_{1})}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,2}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{1}(\alpha_{0} + \alpha_{1})}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,2}^{2}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{1}(\alpha_{0} + \alpha_{1})}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,2}^{2}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{1}(\alpha_{0} + \alpha_{1})}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,2}^{2}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{1}(\alpha_{0} + \alpha_{1})}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,2}^{2}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{1}(\alpha_{0} + \alpha_{1})}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\eta\beta_{2,2}^{2}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{1}(\alpha_{0} + \alpha_{1})}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} \\ &+ \frac{\beta\beta_{2,2}^{2}$$
$$- \frac{\beta_{2,1}\beta_{2,2}^{2}\beta_{2,3}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0}(\alpha_{0} + \alpha_{1})}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} + \frac{\beta_{2,1}^{2}\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(5\alpha_{0} + 9\alpha_{1})}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} + \frac{\eta\beta_{2,1}\beta_{2,2}\beta_{2,3}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\alpha_{0}\beta_{1}}{8(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} + \frac{\eta\beta_{2,1}^{2}\beta_{2,3}^{2}\tau_{3}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(\alpha_{0}^{2} + 9\alpha_{1}^{2})}{16(\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6}.$$
(6.117)

$$\begin{split} \Gamma_{xz} &= \frac{\tau_1 k^2}{h^2} a_0 (\beta_0 - \beta_3) \\ &+ \frac{\eta \beta_{23} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{2(\beta_0 - \beta_3)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)} \right] k^2 \\ &- \frac{\beta_{2,3}^2 \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 \alpha_0 (\alpha_0 - \alpha_1) + (\beta_0 - \beta_3) (\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3) + 18\beta_3^2 (\tau_3/\tau_1)}{4 (\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^2 \\ &- \frac{2\eta^2 \beta_{2,3}^2 \tau_1}{h^2} \left[ \frac{1}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^2 \\ &+ \frac{\eta \beta_{3,3}^2 \tau_1}{h^2} \left[ \frac{\beta_0 - \beta_1 - 2\beta_3}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^3} \right] k^2 \\ &+ \frac{\beta_{2,1}^2 \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 (\alpha_0 - \alpha_1)^2 + (\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)^2 + 36\beta_3^2 (\tau_3/\tau_1)}{32(\epsilon_0 - \epsilon_1)^4} \right] k^2 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,1} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{\beta_0 - \beta_3 (1 + \tau_3/\tau_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)} \right] k^4 \\ &+ \frac{\beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{\beta_0 - \beta_3 (1 + \tau_3/\tau_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)} \right] k^4 \\ &- \frac{\beta_{2,2} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 \alpha_0 (\alpha_0 + \alpha_1) - 3 (\beta_0 - \beta_1) (\beta_1 + \beta_3) + 3 (\beta_0 - \beta_1) \beta_3 (\tau_3/\tau_1)}{16(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &- \frac{\eta \beta_{2,2} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{\alpha_0 (\alpha_0 - \alpha_1) - 4 (\beta_0 + \beta_1) (\beta_0 + \beta_1)}{4(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &- \frac{\eta \beta_{2,2} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{\alpha_0 (\tau_0 - \alpha_1) - 4 (\beta_0 - \beta_3)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &- \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{\alpha_0 (\tau_0 - 1) - 1 (\alpha_1 + 5 (\beta_0 + \beta_1) (\beta_1 - \beta_3) - 3 (\beta_0 + \beta_1) \beta_3 (\tau_3/\tau_1)}{2(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,3} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{3 (\beta_0 - \beta_1)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 (\beta_0 + \beta_1)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,3} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{1 (\beta_0 - \beta_1)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,3} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 (\beta_0 + \beta_1)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,3} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 (\beta_0 - \beta_1)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,3} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 (\beta_0 - \beta_1)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,3} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 (\beta_0 - \beta_1)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,3} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 (\beta_0 - \alpha_1)}{2 (\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,3} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 (\beta_0 - \alpha_1)}{2 (\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,3} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 (\beta_0 - \alpha_1)}{2 (\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,3} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 (\beta_0 - \alpha_1)}{2 (\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right] k^4 \\ &+ \frac{\eta \beta_{2,3} \beta_{2,3} \tau_1}{h^2} \left[ \frac{4 (\beta_0 - \alpha_1)}{2 (\epsilon_0 - \epsilon_1)^2} \right$$

$$\begin{array}{l} + \frac{\eta^2 \beta_{2,2}^2 \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(a_0^2 + 127 a_1^2) + 12\beta_0^2 - 2\beta_1^2 (5 - \tau_3/\tau_1)}{64(c_0 - c_1)^4} \right] k^5 \\ + \frac{\eta \beta_{2,1}^2 r_1}{\hbar^2} \left[ \frac{\beta_1(c_0 + a_1)(1 + \tau_3/\tau_1) + 12a_1(\beta_0 - \beta_1)}{32(c_0 - c_1)^4} \right] k^5 \\ + \frac{\eta \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(3\beta_0 - 11\beta_1)(1 + \tau_3/\tau_1)}{32(c_0 - c_1)^2} \right] k^6 \\ + \frac{\eta^2 \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{\beta_1(a_0 - a_0) - 64(\beta_0 + \beta_1)}{32(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\eta \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{\beta_1(a_0 - a_1) - 64(\beta_0 + \beta_1)}{32(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\eta \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - a_1) - (\alpha_0 + 3\alpha_1)(\tau_3/\tau_1)}{4(c_0 - c_1)^3} \right] k^6 \\ + \frac{\eta \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - a_1)(7a_0 - 11a_1) + 20(\beta_0 + \beta_1)^2}{32(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ - \frac{\beta_{2,1} \beta_{2,2} \sigma_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - a_1)(7a_0 - 11a_1) + 20(\beta_0 + \beta_1) - 2\beta_3)}{32(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ - \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{2,3} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0^2 - \alpha_1^2) + 16(\beta_0 + \beta_1)(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)}{16(c_0 - c_1)^4} \right] k^4 \\ - \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{2,3} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)\beta_1 + 4\alpha_1(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)}{8(c_0 - c_1)^4} \right] k^4 \\ + \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{3,1} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)\beta_1 + 4\alpha_1(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3)}{8(c_0 - c_1)^2} \right] k^6 \\ + \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{2,3} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)\beta_1 + 4\alpha_1(\beta_0 - \alpha_1)^2 + 5(\beta_0 + \beta_1)(\beta_0 + \beta_1 - 2\beta_3) + 6(\beta_0 + \beta_1)\beta_3(\tau_3/\tau_1)}{16(c_0 - c_1)^4} \right] k^4 \\ + \frac{\eta \beta_{2,2} \beta_{3,1}^2 \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)(1 + \tau_1/\tau_1)}{2(c_0 - c_1)^2} \right] k^6 \\ + \frac{\beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)(1 + \tau_1/\tau_1)}{32(c_0 - c_1)^2} \right] k^6 \\ + \frac{\beta_{2,2} \beta_{3,1}^2 \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)(1 + \tau_1/\tau_1)}{32(c_0 - c_1)^3} \right] k^6 \\ + \frac{\beta_{2,2} \beta_{3,1} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + 128(\beta_0 + \beta_1)^2}{128(c_0 - c_1)^3} \right] k^6 \\ + \frac{\beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + 128(\beta_0 + \beta_1)^2}{128(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + 128(\beta_0 + \beta_1)^2}{128(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + 128(\beta_0 - \beta_1)^2}{128(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[ \frac{(\alpha_0 - \alpha_1)^2 + 128(\beta_0 - \beta_1)^2}{128(c_0 - c_1)^4} \right] k^6 \\ + \frac{\beta_{2,2} \tau_1}{\hbar^2} \left[$$

$$+ \frac{\eta \beta_{2,2}^{2} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{1} (\alpha_{0} + \alpha_{1}) (1 + \tau_{3}/\tau_{1}) + 12\alpha_{1} (\beta_{0} - \beta_{1})}{32 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} 
+ \frac{\eta \beta_{2,1} \beta_{2,2}^{2} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(3\beta_{0} - 11\beta_{1}) (1 + \tau_{3}/\tau_{1})}{32 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} \right] k^{6} 
+ \frac{\eta^{2} \beta_{2,1} \beta_{2,2} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(\alpha_{0} - 9\alpha_{1})}{8 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{2}} \right] k^{6} 
+ \frac{\eta^{3} \beta_{2,2} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{\beta_{1} (\alpha_{0} - \alpha_{1}) - 64 (\beta_{0} + \beta_{1})}{32 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} 
+ \frac{\eta \beta_{2,1}^{2} \beta_{2,3} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(\beta_{0} + \beta_{1}) (5 - 3(\tau_{3}/\tau_{1}))}{16 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} 
+ \frac{\eta \beta_{2,1}^{2} \beta_{2,2} \beta_{2,3} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(7\alpha_{0} - 11\alpha_{1}) - (\alpha_{0} + 3\alpha_{1}) (\tau_{3}/\tau_{1})}{4 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{3}} \right] k^{6} 
+ \frac{\eta^{2} \beta_{2,1} \beta_{2,2} \beta_{2,3} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{(\alpha_{0} - \alpha_{1}) (7\alpha_{0} - 11\alpha_{1}) + 20 (\beta_{0} + \beta_{1})^{2}}{32 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6} 
- \frac{\beta_{2,1} \beta_{2,2}^{2} \beta_{2,3} \tau_{1}}{\hbar^{2}} \left[ \frac{4 (\alpha_{0} + \alpha_{1}) (7\alpha_{0} - 11\alpha_{1}) + 4 (\alpha_{0} + \alpha_{1}) (\alpha_{0} + 3\alpha_{1}) \frac{\tau_{3}}{\tau_{1}} - (\beta_{0}^{2} - \beta_{1}^{2}) \left(15 + \frac{\tau_{3}}{\tau_{1}}\right)}{144 (\varepsilon_{0} - \varepsilon_{1})^{4}} \right] k^{6}$$
(6.118)

#### 6.3.0.2 Comparação com trabalhos conhecidos [110]

Muitos trabalhos calculam o tempo de relaxação de spin para um poço quântico crescido na direção [110].<sup>14</sup> No entanto, esses trabalhos calculam os tempos de relaxação de spin para os Hamiltonianos  $\mathcal{H}_{Rashba}^{[110]}$  e  $\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]}$  sem o termo cúbico, projetados apenas na primeira subbanda de  $\mathcal{H}_{QW}^{[110]}$ .

Nesse aspecto, esse trabalho contém resultados novos na literatura. Uma vez que nosso Hamiltoniano efetivo (5.55) sobre a primeira subbanda  $|k, 0, \uparrow (\downarrow)\rangle_{[110]}$  leva em conta a influência da segunda subbanda via teoria de perturbação de Löwdin até  $\mathcal{O}(k^3)$ .

Sendo assim, para compararmos nossos resultados com os conhecidos na literatura devemos desacoplarmos as duas primeiras subbandas. Dessa maneira, devemos tomar os parâmetros do subbespaço  $|k, 0, \sigma\rangle\langle k, 1, \sigma'|$  como sendo zero. Ou seja,

$$\eta = \beta_{2,1} = \beta_{2,2} = \beta_{2,3} = 0, \tag{6.119}$$

	14	Resultados simplificados
$\Gamma_{xx}$	$(\alpha_1^2 + \beta^2)C$	$\frac{\tau_{1}k^{2}}{2h^{2}}\left[4\alpha_{0}^{2}+(\beta_{0}-\beta_{3})^{2}+9\beta_{3}^{2}(\tau_{3}/\tau_{1})\right]$
$\Gamma_{yy}$	$(\alpha_0^2 + \beta^2)C$	$\frac{\tau_{1}k^{2}}{2\hbar^{2}}\left[4\alpha_{0}^{2}+\left(\beta_{0}-\beta_{3}\right)^{2}+9\beta_{3}^{2}\left(\tau_{3}/\tau_{1}\right)\right]$
$\Gamma_{zz}$	$(\alpha_0^2 + \alpha_1^2)C$	$\frac{4a_0^2\tau_1k^2}{\hbar^2}$
$\Gamma_{xz}$	$\alpha_2 \beta C$	$rac{ au_1k^2}{\hbar^2}lpha_0\left(eta_0-eta_3 ight)$

Tabela 6.2 – Tabela comparando as taxas de relaxação  $\Gamma_{xx}$ ,  $\Gamma_{yy}$ ,  $\Gamma_{zz}$  e  $\Gamma_{xz}$  obtidos usando nosso modelo sem acoplamento intersubbanda com os tempos de outras referências.  $C = \frac{4\tau_1 m^*}{\hbar^4} E_F$ 

o que simplifica nossos tensores à

$$\Gamma_{xx} = \Gamma_{yy} = \frac{\tau_1 k^2}{2\hbar^2} \left[ 4\alpha_0^2 + (\beta_0 - \beta_3)^2 + 9\beta_3^2 (\tau_3/\tau_1) \right]$$
(6.120)

$$\Gamma_{zz} = \frac{4\alpha_0^2 \tau_1 k^2}{\hbar^2}$$
(6.121)

$$\Gamma_{xz} = \Gamma_{zx} = \frac{\tau_1 k^2}{\hbar^2} \alpha_0 \left(\beta_0 - \beta_3\right) \tag{6.122}$$

Não há expressões na literatura para o tempo de relaxação na direção [110] considerando a inclusão do termo cúbico  $\beta_3$ , dessa maneira, tomando  $\beta_3 = 0$  obtemos os valores encontrados na literatura.<sup>14</sup>

Nota-se olhando a referência,<sup>14</sup> que as expressões não são exatamentes as mesmas dada pela Tab. (6.2). Para obtê-la devemos tomar  $\alpha_1 = \alpha_2$ , que corresponde ao quadro trabalhado por nós.

### 148CAPÍTULO 6. MECANISMO DE RELAXAÇÃO DE SPIN VIA D'YAKONOV-PEREL'

## CAPÍTULO 7

### RESULTADOS

No capítulo 6, derivamos as expressões analíticas dos tempos de relaxação do spin do elétron em poços quanticos crescidos nas direções [001] e [110] respectivamente. Estes tempos são escritos em função dos parâmetros de Rashba e Dresselhaus inter e intrabanda, os quais são determinados encontrando-se os autoestados  $|k, 0, 1, \uparrow (\downarrow)\rangle_{[abc]}$ , soluções obtidas auto-consistentemente a partir do Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{QW}^{[abc]}$ . Como primeira aproximação, consideraremos os parâmetros  $m_{[abc]}^*$ ,  $\delta_6^{[abc]}$ ,  $\delta_7^{[abc]}$ ,  $\delta_8^{[abc]}$  como sendo iguais aos da direção [001], de modo que os autoestados  $|k, 0, 1, \uparrow (\downarrow)\rangle_{[abc]}$  serão autoestados da direção de crescimento [001] da heteroestrutura.<sup>7,9,10,18</sup> Dessa maneira, calculamos os parâmetros de forma auto-consistente e os mostramos em função do potencial elétrico aplicado, do tamanho do poço quântico e finalmente em função da densidade de elétrons. Por fim utilizamos estes parâmetros para a obtenção do tempo de relaxação de spin e concluímos que a contribuição do tempo de relaxação total devido à segunda banda é desprezível.

### 7.1 Sistemas a serem simulados

Os resultados nessa dissertação foram realizados utilizando um poço quântico simples de  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  (para a qual escolhemos x = 0.3) com tamanho de 2Lmostrado na Fig. (7.1). Este poço possuí largura  $L_w$  e doadores do tipo n, de densidade simétrica  $\rho_d$ , localizados à uma distância  $L_d$  da parede do poço, cuja sua função é a de doar elétrons para o nosso sistema. Esse sistema também está sujeito a uma diferença de potencial externa,  $V_G(L) - V_G(-L)$ o que além de controlar o grau de assimetria estrutural, também é usado para controlar espacialmente a densidade de elétrons dentro do poço.

Para a realização do cálculo numérico, foram utilizados parâmetros extraidos de<sup>21</sup> e.<sup>35</sup>



Figura 7.1 – Esquema da nossa estrutura  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  com tamanho do poço  $L_w$  e tamanho total 2L. A estrutura possui densidade de doadores simetrico  $\rho_d$ , dispostos simetricamente à uma distância  $L_d$  do poço. A região cinza representa os gates metálicos, responsáveis pelas diferença de potencia aplicado  $V_G(-L)$  e  $V_G(L)$ .

### 7.2 Uma banda ocupada

Nesta seção resolvemos o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{QW}$  (equação (4.1)) acoplada à equação de Poisson (equação (4.8)) como descrito na seção 5.2. Aqui, nós fixamos a densidade eletrônica em  $n_e = 0.002 \,(\text{nm})^{-2}$ , densidade esta que corresponde à eletrons ocupando somente a primeira banda de energia. Dessa maneira, a densidade dos doadores é  $n_d = 0.001 \,(\text{nm})^{-2}$ . Aqui, também aplicamos uma diferença de potencial correspondente à  $V_G(-L) = 0$  e  $V_G(L) = 0.15 eV$ .

As Figs. (7.2a) e (7.3a) mostram os perfis dos potenciais  $V_G, V_e, V_w, V_{sc}$  e das funções de onda para um poço de 15nm. Já as Figs. (7.2b) e (7.3b) mostram os perfis das mesmas grandezas, mas agora utilizando um poço de 30nm.

Olhando para as Figs. (7.2a) e (7.2b) vemos que existe uma inclinação positiva em  $V_{sc}$ , tornando o poço assimétrico e mais fundo no canto esquerdo. Utilizando agora as Figs. (7.3a) e (7.3b) vemos que essa inclinação é resultado da diferença de potencial aplicado, representado aqui pela linha verde. Essa diferença de profundidade por sua vez



Figura 7.2 – Funções envelope  $\langle r | i \rangle = \psi_i$  para a largura do poço quântico (a) 15nm (b)30nm. Aqui só temos a ocupação da primeira banda,  $V_G(L) - V_G(-L) = 0.15eV$ ,  $n_e = 0.002 \text{ (nm)}^{-2}$  e  $n_d = 0.001 \text{ (nm)}^{-2}$ .



Figura 7.3 – Perfis dos potenciais: eletrônico  $V_e$ , externo somado ao potencial dos doadores  $V_g$ , autoconsistente  $V_s c$  e heteroestrutural  $V_w$  para dois tamanhos de poços diferentes, com elétrons ocupando somente a primeira banda (a) 15nm (b)30nm. Utilizamos aqui  $n_e = 0.002 \,(\text{nm})^{-2}$  e  $n_d = 0.001 \,(\text{nm})^{-2}$ .

é responsável por um maior confinamento das funções de onda ao lado esquerdo do nosso poço como se pode ver claramente na Fig. (7.2b).

Para a Fig. (7.2a), obtemos os valores  $\varepsilon_0^{15nm} = 0.1146 \, eV$ ,  $\varepsilon_1^{15nm} = 0.1646 \, eV$ ,  $\mu^{15nm} = 0.1217 \, eV$  e portanto  $\Delta \varepsilon^{15nm} = 0.050 eV$ . Já para a Fig. (7.2b), obtemos  $\varepsilon_0^{30nm} = 0.1051 \, eV$ ,  $\varepsilon_1^{30nm} = 0.1216 \, eV$ ,  $\mu^{30nm} = 0.1122 \, eV$  e portando  $\Delta \varepsilon^{30nm} = 0.016 eV$ .

Sabendo que o valor da diferença entre dois níveis de energia deve diminuir em função

$\alpha_0 = \langle 0   \eta(z)   0 \rangle$	$eta_0 = - \gamma ig\langle 0    \partial_z^2    0 ig angle$	$eta_{2,1} = \gamma \left< 0 \right  \partial_z \left  1 \right>$
$\alpha_1 = \langle 1   \eta(z)   1 \rangle$	$eta_1 = -\gamma \left< 1 \right  \partial_z^2 \left  1 \right>$	$eta_{2,2} = -\gamma \left< 0 \right  \partial_z^2 \left  1 \right>$
$\eta = \langle 0   \eta(z)   1 \rangle$		$eta_{2,3} = \gamma \left< 0 \right  \partial_z^3 \left  1 \right>$

Tabela 7.1 – Tabela com as definições dos parâmetros de Rashba e Dresselhaus intra e intersubbanda.

do aumento do tamanho do poço  $L_w$ , obtemos dados consistentes para  $\Delta \varepsilon^{15nm}$  e  $\Delta \varepsilon^{30nm}$ . Como esperado, vemos que o potencial químico  $\mu$  está abaixo da energia  $\varepsilon_1$  para ambos tamanho do poço, comprovando assim que a densidade  $n_e$  utilizada nos garante a ocupação somente da primeira subbanda.

Iremos calcular agora os parâmetros  $\alpha's \in \beta's$  (Tab. 7.1) para duas configurações experimentalmente relevantes. A primeira é obtido mantendo as densidades  $n_e = 0.002 \,(\text{nm})^{-2}$  e  $n_d = 0.001 \,(\text{nm})^{-2}$  fixas, onde tomando  $V_G(-L) = 0$  variamos  $V_G(L)$  de -0.15eV à 0.15eV para os tamanhos  $L_w = 15$  e 30nm. A segunda é obtido mantendo  $V_G(L) = 0.10eV$ ,  $n_e = 0.002 \,(\text{nm})^{-2}$  e  $n_d = 0.001 \,(\text{nm})^{-2}$  fixos, onde variamos agora  $L_w$  de 15nm à 30nm.

As Figs. (7.4a) e (7.4b) mostram o comportamento dos parâmetros de Rashba e Dresselhaus sobre o primeiro aspecto. Observando estas figuras vemos que os parâmetros de Rashba intrabanda  $\alpha_0$  e  $\alpha_1$  são sensíveis à variação de  $V_G$ , sempre mantendo a relação  $|\alpha_0| > |\alpha_1|$ . Vemos também que estes parâmetros para  $V_G(L) = 0$ . Esses comportamentos se devem pois esses parâmetros estão ligados diretamente à assimetria do nosso poço, sendo assim bem sensíveis ás mudanças destes.<sup>35</sup> Dessa maneira, uma vez que  $V_G(L) = 0$ .

Diferentemente dos parâmetros de Rashba intrabanda, o parâmetro de interbanda  $\eta$  para as especificações do nosso poço não é sensível à variação de  $V_G$ , o que como veremos passa a ser sensível à variação de  $V_G$  para maiores densidade eletrônica e para poços duplos.<sup>5,35</sup> Este parâmetro também não assume o valor nulo em poços totalmente simétricos. Dessa maneira, mesmo este sendo um parâmetro de Rashba, vemos que seu comportamento não está ligado fortemente à assimetria do poço.<sup>5,35</sup> Nota-se também que mesmo sendo este um parâmetro interbanda, o seu valor em módulo é comparável aos parâmetros de Rashba.<sup>5,35</sup>

Nas Figs. (7.4a) e (7.4b), observamos que os parâmetros de Dresselhaus intrabanda  $\beta_0$ e  $\beta_1$  não se mostram tão sensíveis a variação de  $V_G$  e sempre mantêm a relação  $|\beta_1| > |\beta_0|$ .



Figura 7.4 – Perfis dos parâmetros  $\alpha's \in \beta's$  em função do gate aplicado, com elétrons ocupando somente a primeira banda de energia. (a) 15nm (b) 30nm. Utilizamos aqui  $n_e = 0.002 \,(\text{nm})^{-2}$  e  $n_d = 0.001 \,(\text{nm})^{-2}$ . O parâmetro  $\beta_3$  não foi mostrado no gráfico uma vez que este é uma constante em função de  $V_q$ .

Utilizando a equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{sc}(z)\right]\varphi_0(z) = \varepsilon_0\varphi_0(z),\tag{7.1}$$

resolvida auto-consistentemente, podemos reescrever<sup>35</sup>

$$\beta_n = \gamma \frac{2m^*}{\hbar^2} [\varepsilon_n - \langle n | V_{sc} | n \rangle], \qquad (7.2)$$

onde além de vermos diretamente a forte dependência com o confinamento, vemos também a relação  $|\beta_1| > |\beta_0|$  ser satisfeita uma vez que  $\varepsilon_1 > \varepsilon_0$  junto ao fato de que  $\langle 0| V_{sc} |0\rangle > \langle 1| V_{sc} |1\rangle$ . Nota-se que o mesmo comportamento em relação à  $V_G$  acontece para o parâmetro de Dresselhaus interbanda  $\beta_{2,1}$ .

Diferentemente dos parâmetros  $\beta_0$ ,  $\beta_1$  e  $\beta_{2,1}$ , o parâmetro de Dresselhaus interbanda  $\beta_{2,2}$  é sensível à variação de  $V_G$  como os parâmetros de Rashba intrabanda os são, além de também ser zero para  $V_G(L) = 0$ . Isso nos mostra que  $\beta_{2,2}$  também está fortemente ligado à assimetria do nosso poço. Estes resultados podem ser entendidos diretamente reescrevendo o parâmetro  $\beta_{2,2}$  com o auxílio da Eq. (7.1), o que resulta em

$$\beta_{2,2} = -\gamma \langle 0 | \partial_z^2 | 1 \rangle = \gamma \langle 0 | \left[ \frac{2m^*}{\hbar^2} \left( \varepsilon_1 - V_{sc}(z) \right) \right] | 1 \rangle$$
  
$$= -\gamma \frac{2m^*}{\hbar^2} \langle 0 | V_{sc}(z) | 1 \rangle.$$
(7.3)

Sabemos pelo capítulo 5. que diferentemente do poço crescido na direção [001], o poço crescido na direção [110] além de conter os parâmetros  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1$ ,  $\eta$ ,  $\beta_0$ ,  $\beta_1$ ,  $\beta_{2,1}$ ,  $\beta_{2,2}$  também contém o parâmetro  $\beta_{2,3}$ . Analisando as Figs. (7.5a) e (7.5b) observamos que este parâmetro não é tão sensível à assimetria do poço. Uma forma direta de ver isso é utilizar novamente a Eq. (7.1), o que resulta em

$$\beta_{2,3} = \gamma \langle 0 | \partial_z^3 | 1 \rangle = -\gamma \langle 0 | \partial_z \left[ \frac{2m^*}{\hbar^2} (\varepsilon_1 - V_{sc}(z)) \right] | 1 \rangle$$
  
$$= -\gamma \frac{2m^*}{\hbar^2} \varepsilon_1 \langle 0 | \partial_z | 1 \rangle + \gamma \frac{2m^*}{\hbar^2} \langle 0 | \partial_z V_{sc}(z) | 1 \rangle$$
  
$$= -\varepsilon_1 \frac{2m^*}{\hbar^2} \beta_{2,1} + \gamma \frac{2m^*}{\hbar^2} \langle 0 | \partial_z V_{sc}(z) | 1 \rangle.$$
(7.4)

Dessa maneira compreendemos a dependência fraca de  $\beta_{2,3}$  com a assimetria do poço, uma vez que  $\beta_{2,3}$  é proporcional aos parâmetros  $\beta_{2,1}$  e  $\eta$  (uma vez que  $\langle 0 | \partial_z V_{sc} | 1 \rangle \propto \eta$ ), e estes ultimos por sua vez não são tão sensíveis a assimetria do poço.



Figura 7.5 – Perfil do parâmetro  $\beta_{2,3}$  em função do gate aplicado, com elétrons ocupando somente a primeira banda de energia. (a) 15nm (b) 30nm. Utilizamos aqui  $n_e = 0.002 \,(\text{nm})^{-2}$  e  $n_d = 0.001 \,(\text{nm})^{-2}$ .

As Figs. (7.6) e (7.7) representam o segundo aspecto, o qual só deixa mais forte o argumento que demos anteriormente sobre a sensibilidade dos parâmetros com a assimetria ou com o confinamento. Para os parâmetros  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1$ ,  $\beta_{2,2}$  encontramos a ausência de uma forte sensibilidade ao tamanho do poço, enquanto que para os parâmetros  $\beta_0$ ,  $\beta_1$ ,  $\beta_{2,1}$ ,  $\beta_{2,3}$ ,  $\eta$  encontramos uma total sensibilidade à este. Lembrando o resultados de mecânica quântica de que uma função de onda estará mais confinada quanto menor for o tamanho do poço, observamos uma outra evidência de que os parâmetros  $\beta_0$ ,  $\beta_1$ ,  $\beta_{2,1}$ ,  $\beta_{2,3}$ ,  $\eta$  provêm majoritariamente deste confinamento, uma vez que os valores destas constantes diminuem em função do aumento do poço.



Figura 7.6 – Perfis dos parâmetros  $\alpha's \in \beta's \in (nm)^{-2}$  en função do tamanho do poço quântico  $L_w$  fixado  $\Delta V_g = 0.10 eV$ . Utilizamos aqui  $n_e = 0.002 \text{ (nm)}^{-2}$  e  $n_d = 0.001 \text{ (nm)}^{-2}$ 



Figura 7.7 – Perfil do parâmetro  $\beta_{2,3}$  em função do tamanho do poço quântico  $L_w$  fixado  $\Delta V_g = 0.10 eV$ . Utilizamos aqui  $n_e = 0.002 \,(\text{nm})^{-2}$  e  $n_d = 0.001 \,(\text{nm})^{-2}$ 

### 7.3 Duas subbandas ocupadas

Afim de ocuparmos agora as duas primeiras subbandas, resolvemos o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{QW}$  (equação (4.1)) junto com à equação de Poisson (4.8), para densidade eletrônica  $n_e = 0.012 (nm)^{-2}$ . Dessa maneira, a densidade dos doadores é de  $n_d = 0.006 (nm)^{-2}$ . Aqui também aplicamos uma diferença de potencial correspondente à  $V_G(-L) = 0$  e  $V_G(L) = 0.15 eV$ .

As Figs. (7.8a), (7.9a) nos mostram os perfis dos potenciais  $V_G$ ,  $V_e$ ,  $V_w$ ,  $V_{sc}$  e das funções de onda para a largura do poço igual à 15nm. Já as Figs. (7.8b), (7.9b) mostram os mesmos perfis mas agora utilizando a largura do poço de 30nm.



Figura 7.8 – Funções envelope  $\langle r | i \rangle = \psi_i$  para a largura do poço quântico (a) 15nm (b)30nm. Aqui temos a ocupação dos elétrons na primeira e na segunda banda parcialmente,  $V_G(L) - V_G(-L) = 0.15eV$ ,  $n_e = 0.012 \text{ (nm)}^{-2}$  e  $n_d = 0.006 \text{ (nm)}^{-2}$ .

Olhando para as Figs. (7.8a) e (7.8b) percebemos que comparado as Figs. (7.2a) e (7.2b) o fundo do nossos poços estão mais elevados. Olhando para as Figs. (7.9a) e (7.9b) percebemos que essa contribuição provém da linha preta destes gráficos, linha esta que representa o potencial devido aos elétrons  $V_e$ . Esse aumento no potencial eletrônico já era esperado uma vez que a densidade de elétrons foi elevada em quase uma ordem de grandeza.

Para a Fig. (7.8a), obtemos os valores  $\varepsilon_0^{15nm} = 0.2263 \, eV$ ,  $\varepsilon_1^{15nm} = 0.2683 \, eV$ ,  $\mu^{15nm} = 0.2687 \, eV$  e portanto  $\Delta \varepsilon^{15nm} = 0.0420 \, eV$ . Já para a Fig. (7.8b), obtemos



Figura 7.9 – Perfis dos potenciais: eletrônico  $V_e$ , externo somado ao potencial dos doadores  $V_g$ , autoconsistente  $V_{sc}$  e heteroestrutural  $V_w$  para dois tamanhos de poços diferentes, com elétrons ocupando a primeira e a segunda banda parcialmente (a) 15nm (b)30nm. Utilizamos aqui  $n_e = 0.012 \,(\text{nm})^{-2}$  e  $n_d = 0.006 \,(\text{nm})^{-2}$ .

 $\varepsilon_0^{30nm} = 0.2299 \, eV$ ,  $\varepsilon_1^{30nm} = 0.2393 \, eV$ ,  $\mu^{30nm} = 0.2560 \, eV$  e portando  $\Delta \varepsilon^{30nm} = 0.009 eV$ .

Como já discutido na seção 8.2, as energias e a diferença destas diminuiram com o aumento de  $L_w$ , uma vez que essas grandezas tem dependência com o inverso do tamanho do poço  $L_w$ . Observamos também que o potencial químico para ambas figuras estão acima da energia da segunda banda, comprovando assim que a densidade utilizada nos garante a ocupação das suas primeiras subbandas.

Nota-se aqui que diferentemente do caso onde temos somente uma banda ocupada, a inclinação de  $V_G$  (devido ao gate aplicado) junto ao grande potencial  $V_e$  (potencial devido à distribuição eletrônica) influência com um peso muito maior, o confinamento da função de onda nos cantos do poço. Dessa maneira, observa-se aqui pelas Figs. (7.8a) e (7.8b) que o potencial eletrônico  $V_e$  faz o papel de um poço quântico duplo efetivo, pois como observamos, existe uma "barreira central" entre ambas extremidades do nosso poço.

Seguindo o mesmo procedimento da seção 8.2, iremos calcular agora os parâmetros  $\alpha$ 's e  $\beta$ 's mantendo-se as densidades  $n_e = 0.012 \,(\text{nm})^{-2}$  e  $n_d = 0.006 \,(\text{nm})^{-2}$  fixas, onde tomando  $V_G(-L) = 0$  variamos  $V_G(L)$  de -0.15eV à 0.15eV para os tamanhos  $L_w = 15$ nm e 30nm. Fazendo isso, obtemos as Figs. (7.10a) e (7.10b).

Comparando as Figs. (7.10a) e (7.10b), vemos que diferentemente das Figs. (7.4a) e (7.4b), encontramos uma diferença qualitativa no comportamento de  $\alpha_1$  (em função de  $V_G$ )



Figura 7.10 – Perfis dos parâmetros  $\alpha's \in \beta's \text{ em função do gate aplicado, com elétrons ocupando$ a primeira e parcialmente segunda banda de energia. (a) 15nm (b) 30nm. Utilizamos $aqui <math>n_e = 0.012 \text{ (nm)}^{-2} \text{ e } n_d = 0.006 \text{ (nm)}^{-2}$ . O parâmetro  $\beta_3$  não foi mostrado no gráfico uma vez que este é uma constante em função de  $V_q$ .



Figura 7.11 – Gráfico do parâmetro  $\beta_{2,3}$  em função do gate aplicado, com elétrons ocupando somente a primeira banda de energia. (a) 15nm (b) 30nm. Utilizamos aqui  $n_e = 0.012 (nm)^{-2}$  e  $n_d = 0.006 (nm)^{-2}$ .

quando o tamanho passa de 15nm para 30nm. Nas Figs. (7.4a), (7.4b) e (7.10a), vemos que  $\alpha_1$  assim como o parâmetro  $\alpha_0$  decresce em função de  $V_G$ . No entanto, vemos pela Fig. (7.10b) que o parâmetro  $\alpha_1$  agora cresce em função de  $V_G$  para  $L_w = 30$ nm. Dessa maneira, um poço largo com densidade eletrônica alta é efetivamente um poço duplo, resultado esse mostrado e discutido em.<sup>35</sup>

Mantendo  $V_G(L) = 0.10 eV$ ,  $n_e = 0.002 (nm)^{-2} e n_d = 0.001 (nm)^{-2}$  fixos, variamos agora  $L_w$  de 15nm à 30nm, obtendo a Fig. (7.12).

Na Fig. (7.12) vemos que os parâmetros  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1$ ,  $\beta_{2,2}$  são mais sensíveis ao tamanho do



Figura 7.12 – Perfis dos parâmetros  $\alpha's \in \beta's$  em função do tamanho do poço quântico  $L_w$  fixado  $\Delta V_g = 0.10 eV$ .



Figura 7.13 – Perfis do parâmetro  $\beta_{2,3}$  em função do tamanho do poço quântico  $L_w$  fixado  $\Delta V_g = 0.10 eV$ . Utilizamos aqui  $n_e = 0.002 (nm)^{-2}$  e  $n_d = 0.001 (nm)^{-2}$ 

poço  $L_w$  quando comparados ao da Fig. (7.6). Isso se deve pois para a Fig. (7.12) os potenciais  $V_e$  e  $V_g$  são maiores quando comparados aos da Fig. (7.6) e portanto acabam influênciando mais fortemente uma mudança dos parâmetros em relação ao tamanho do poço.

Os parâmetros  $\beta_0$ ,  $\beta_1$ ,  $\beta_{2,1}$ ,  $\beta_{2,3}$ ,  $\eta$  continuam sendo totalmente sensíveis ao tamanho do poço  $L_w$  de modo que a argumentação segue a mesma da feita na seção 8.2.

# 7.4 Tempo de relaxação para o poço quântico crescido na direção [001]

Conhecido os parâmetros de Dresselhaus e Rashba intra e interbanda, conseguimos por meio das fórmulas (6.104) e (6.105) obter os tempos de relaxação em função do vetor de onda k para o poço crescido na direção [001]. Aqui, os tempos de relaxação serão calculados somente para os elétrons com  $k = k_F$  (superfície de Fermi). Elétrons com  $k < k_F$  são impedidos de espalhar elasticamente de um vetor de onda  $\vec{k}$  para  $\vec{k'}$  uma vez que estando abaixo da energia de Fermi não existem estados disponíveis. Sabemos que esses parâmetros dependem do cálculo auto-consistente o que por sua vez depende da energia de Fermi e da densidade eletrônica. Dessa maneira, esses parâmetros são funções de  $k_F$ . Para um gás de elétrons livres, sabemos que o vetor  $k_F$  é relacionado a densidade eletrônica  $n_e$  pela fórmula  $k_F = \sqrt{2\pi n_e}$ .<sup>34</sup> Plotando então esses parâmetros em funções de  $k_F$  obtemos a Fiq. (7.14).

Observando a Fig. (7.14) vemos que tais parâmetros não são tão sensíveis à variação de  $k_F$ , com exceção do parâmetro  $\eta$ . Dessa maneira, como primeira aproximação iremos considerar tais parâmetros como sendo constantes em  $k_F$  e portanto constantes em  $n_e$ . Sendo assim, utilizaremos os parâmetros obtidos para  $n_e = 0.002 (\text{nm})^{-2}$ ,  $L_w = 15$ nm e  $V_G(L) = 0.10 eV$ , mostrados na Tab. (7.2). Utilizamos também  $\tau_3 = \tau_1.^8$ 

Feita essas considerações, obtemos a Fig. (7.15) que mostra a dependência dos parâmetros  $\tau_{\pm}$  e  $\tau_{zz}$  em função da densidade eletrônica  $n_e$  onde o maior tempo de relaxação é o  $\tau_+$ . Nela, vemos que os tempos de relaxação de spin para o poço quântico crescido na direção [001] são menores que *ns* e decrescem em função da densidade eletrônica pois em

Tabela 7.2 -	- Tabela com	os valores dos	parâmetros	utilizados	para o	cálculo	dos temp	os de	relaxação
	utilizando <i>n<sub>e</sub></i>	$h_{2} = 0.002(nm)^{-2}$	$L_{w} = 15 nm$	$e V_G(L) =$	0.10 <i>eV</i>	<i>'</i> .			

$\alpha_0 = -0.937 (meV\text{\AA})$	$\alpha_1 = -0.853 (meV\text{\AA})$	$\eta = -3.615 (meV\text{\AA})$
$\beta_0 = 2.761  (meV  \text{\AA})$	$\beta_1 = 10.644 (meV\text{\AA})$	$\beta_3 = 2.750  k_F^2  (meV  \text{\AA})$
$\beta_{2,2} = 0.395 (m e V \text{\AA})$	$\beta_{2,1} = -159.643 (meV\text{\AA}^2)$	



Figura 7.14 – Dependência dos parâmetros de Rashba e Dresselhaus intra e interbanda em função de  $k_F$  para  $L_w = 15 nm$ . O parâmetro  $\beta_3$  não foi incluido nesse gráfico uma vez que sabemos a dependência deste com  $k_F$ ,  $\beta_3 = \frac{\gamma k_F^2}{4}$ .  $k_F = 0.012$  Å corresponde à densidade eletrônica  $n_e = 0.002 (\text{nm})^{-2}$  e  $k_F = 0.027$  Å corresponde à  $n_e = 0.012 (\text{nm})^{-2}$ .

primeira ordem em  $k_F$  temos  $\tau_{ij} \propto k_F^2$  o que junto à  $k_F = \sqrt{2\pi n_e}$ , nos resulta em  $\tau_{ij} \propto \frac{1}{n_e}$ . Como será mostrado nas Figs. (7.16), (7.17a) e (7.17b) a contribuição devido ao acoplamento interbanda é neglicenciável. Dessa maneira, podemos escrever com o auxílio da Tab. (6.1) a contribuição majoritária dos tempos de relaxação, i.e.,  $\tau_+^{-1} \propto n_e [\alpha_0 + (\beta_0 - \beta_3)]^2$ ,  $\tau_-^{-1} \propto n_e [\alpha_0 - (\beta_0 - \beta_3)]^2$  e  $\tau_z^{-1} \propto n_e [\alpha_0^2 + (\beta_0 - \beta_3)^2]$ . Para o sistema que estamos plotando sabemos que  $\alpha_0 = -0.937 me V$ Å,  $\beta_0 = 2.761 me V$ Å e  $\beta_3 \sim 0.350 me V$ Å (Tab. (7.2)). Dessa maneira vemos diretamente que  $\tau_+ > \tau_-$  pois  $(\alpha_0 - (\beta_0 - \beta_3))^2 > (\alpha_0 + (\beta_0 - \beta_3))^2$ .



Figura 7.15 – Tempos de relaxação para um poço quântico com  $L_w = 15$ nm crescido na direção [001] em função da densidade eletrônica  $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.2).

Afim de analisarmos qual a influência da primeira e da segunda subbanda de mais baixa energia no tempo de relaxação de spin, escrevemos  $\Gamma_{ij} = \Gamma_{ij}^0 + \Gamma_{ij}^1$ . Onde  $\Gamma_{ij}^0$  corresponde à taxa de relaxação devido à da primeira subbanda, representado pela primeira linha das equações (6.104) e (6.105). E o termo  $\Gamma_{ij}^1$  corresponde à taxa de relaxação devido ao acoplamento com a segunda subbanda, representado pelas linhas restantes das equações (6.104) e (6.105).

As Fig. (7.16), (7.17b) e (7.17a) mostram as contribuições da primeira e da segunda subbanda para a taxa de relaxação em função da densidade eletrônica  $n_e$ . Vemos que ambas crescem em função de  $n_e$  uma vez que a parte majoritária das taxas de relaxação de spin são proporcionais à potências de  $n_e$ .



Figura 7.16 – Contribuições das taxas de relaxação  $\Gamma_{zz}$  para um poço quântico com  $L_w = 15nm$  crescido na direção [001] em função da densidade eletrônica  $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.2). As curvas vermelha e preta estão sobrepostas uma vez que a diferença numérica entre elas é imperceptível nesta escala.



Figura 7.17 – Contribuições das taxas de relaxação  $\Gamma_{\pm}$  para um poço quântico com  $L_w = 15 nm$ crescido na direção [001] em função da densidade eletrônica  $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.2). As curvas vermelha e preta estão sobrepostas uma vez que a diferença numérica entre elas é imperceptível nesta escala.

Analisando então as Figs. (7.16), (7.17b) e (7.17a), vemos que para os parâmetros mostrados na Tab. (7.2), a contribuição à taxa de relaxação de spin devido a segunda

$\alpha_0 = -0.937 (meV\text{\AA})$	$\alpha_1 = -0.853 (meV\text{\AA})$	$\eta = -3.615 (meV\text{\AA})$
$\beta_0 = 2.761  (meV  \text{\AA})$	$\beta_1 = 10.644 (meV\text{\AA})$	$\beta_3 = 2.750  k_F^2  (meV  \text{\AA})$
$\beta_{2,2} = 0.395 (meV\text{\AA})$	$\beta_{2,1} = -159.643 (meV\text{\AA}^2)$	$\beta_{2,3} = 0.113 (meV)$

Tabela 7.3 – Tabela com os valores dos parâmetros utilizados para o cálculo dos tempos de relaxação utilizando  $n_e = 0.002(nm)^{-2}$ ,  $L_w = 15nm$  e  $V_G(L) = 0.10eV$ .

banda é menor por duas à três ordens de grandezas, o que por sua vez não gera uma grande diferença qualitativa e muito menos quantitativa entre  $\Gamma_{ij}$  e  $\Gamma_{ij}^0$ , como é observado notando-se que as curvas vermelha e preta essencialmente coincidem nas Figs. (7.16), (7.17b) e (7.17a).

# 7.5 Tempo de relaxação para o poço quântico crescido na direção [110]

Analisando as Eqs. (5.33) e (5.55), vemos o único parâmetro diferente que o Hamiltoniano efetivo na direção [110] possui quando comparado ao Hamiltoniano na [001] é o parâmetro  $\beta_{2,3}$ , parâmetro este relacionado ao confinamento do poço como discutido anteriormente. A variação deste não é mostrado na Fig. (7.14) mas é ~ 20%, de  $n_e = 0.002 \text{ cm}^{-2}$ à  $n_e = 0.012 \text{ cm}^{-2}$ . Mesmo sendo uma variação considerável, esse parâmetro possui um valor muito baixo de forma que sua contribuição é irrelevante. Dessa maneira, devemos adicionar à Tab. (7.2) o valor de  $\beta_{2,3}$  calculado em  $n_e = 0.002 \text{ cm}^{-2}$ , resultando na Tab. (7.3). Plotando então os tempos de relaxação para a direção [110] obtemos a Fig. (7.18). Esta figura, quando comparada com a figura que dos tempos de relaxação de spin para a direção [001] (Fig. (7.15)), nos mostra que utilizando os mesmos parâmetros da Tab. (7.3), encontramos para os poços crescidos na direção [110] um tempo de relaxação essencialmente 10 vezes maior do que para os poços crescidos na direção [001]. Resultado esse consistente com referências experimentais.<sup>9,10</sup>

Nota-se pela Fig. (7.15) que todos os tempos de relaxação decrescem em função da densidade eletrônica e são positivos. No entanto, olhando para a Fig. (7.18), vemos que o tempo de relaxação  $\tau_{xz}$  além de ser negativo, cresce em função de  $n_e$  até  $n_e \sim$ 

 $0.8 \times 10^{12} cm^{-2}$  onde a partir desse valor começa a decrescer. O valor negativo aqui não é um problema uma vez que a componente  $\Gamma_{xz}$  não é a única componente responsável pela relaxação do spin nas direções x e z, como mostram as Eqs. (6.114). Interpretrando as Eqs. (6.114) vemos que essa componente pode agir de forma à bombardear ou decair spins, dependendo do seu respectivo sinal.



Figura 7.18 – Tempos de relaxação para um poço quântico com  $L_w = 15nm$  crescido na direção [110] em função da densidade eletrônica  $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.3). As curvas azul e vermelhas mesmo possuindo diferentes expressões algebricas, (como pode ser visto em (6.115) e (6.116)) estão sobrepostas na escala utilizada.

Afim de entendermos este comportamento peculiar, iremos tomar como sendo nulo o acoplamento interbanda (aproximação esta totalmente razoável como mostraremos a seguir). Dessa maneira, obtemos via Tab. (6.2),  $\tau_{xz}^{-1} \propto n_e \alpha_0 (\beta_0 - \beta_3)$ , ou seja, vemos diretamente que o carácter negativo desse tempo de relaxação é devido ao nosso parâmetro  $\alpha_0 < 0$  como mostra a Tab. (7.3) além de  $\beta_0 - \beta_3 > 0$  para todos os valores de densidades eletrônicas usados por nós. A diferença de comportamento na inclinação de  $\tau_{xz}^{-1}$  pode ser entendida como uma competição de  $\beta_0$  e  $\beta_3$ . Para valores pequenos de  $n_e$ ,  $\beta_0$  domina sobre  $\beta_3$ . No entanto,  $\beta_3$  depende linearmente de  $n_e$  e como consequência, para densidades eletrônicas maiores  $\beta_3$  acaba dominando. Uma outra maneira de ver isso é analisando a derivada de  $\tau_{xz}^{-1}$  com respeito à  $n_e$ , dada por  $\frac{d\tau_{xz}^{-1}}{dn_e} \propto \alpha_0(\beta_0 - 2\beta_3)$ . Com ela vemos que existe um ponto de derivada segunda nula  $\beta_0 = 2\beta_3$ , ponto este correspondente à  $n_e = \frac{\beta_0}{\gamma \pi} \sim 0.78 \times 10^{12} \, cm^{-2}$ , identificado claramente na Fig. (7.18).

Agora, iremos analisar novamente a influência das subbandas no cálculo dos tempos de relaxação de spin. Dessa maneira, escrevemos novamente  $\Gamma_{ij} = \Gamma_{ij}^0 + \Gamma_{ij}^1$ . Onde  $\Gamma_{ij}^0$ corresponde à taxa de relaxação devido à primeira banda, representado pela primeira linha das equações (6.115), (6.116), (6.117) e (6.118). O termo  $\Gamma_{ij}^1$  corresponde à taxa de relaxação devido ao acoplamento com a segunda banda, representado pelas linhas restantes das equações (6.115), (6.116), (6.117) e (6.118). As Figs. (7.19a), (7.19b), (7.20a) e (7.20b) mostram as contribuições da primeira e da segunda subbanda para a taxa de relaxação de spin em função da densidade eletrônica  $n_e$ .



Figura 7.19 – Contribuições das taxas de relaxação  $\Gamma_{xx}$ ,  $\Gamma_{yy}$  para um poço quântico com  $L_w = 15 nm$ crescido na direção [110] em função da densidade eletrônica  $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.3). As curvas vermelha e preta estão sobrepostas uma vez que a diferença numérica entre elas é imperceptível nesta escala.

Analisando então as Figs. (7.19a), (7.19b), (7.20a) e (7.20b), vemos que para os parâmetros usados na Tab. (7.3) a contribuição à taxa de relaxação de spin devido a segunda banda é menor por duas à quatro ordens de grandezas, o que novamente não gera uma grande diferença qualitativa entre  $\Gamma_{ij} \in \Gamma_{ij}^0$  como é observado pelas curvas pretas e vermelhas.

Dessa maneira, concluímos que a influência da segunda subbanda não produz mudanças nem qualitativa nem quantitativa nas taxas de relaxação do spin do elétron em poços quânticos crescidos nas direções [001] e [110]. Como consequência, não devemos encontrar diferenças significativas nos resultados obtidos considerando somente a projeção na pri-



Figura 7.20 – Contribuições das taxas de relaxação  $\Gamma_{zz}$ ,  $\Gamma_{xz}$  para um poço quântico com  $L_w = 15 nm$ crescido na direção [110] em função da densidade eletrônica  $n_e$ . Os parâmetros de Rashba e Dresselhaus utilizados aqui são correspondentes ao da Tab. (7.3). As curvas vermelha e preta estão sobrepostas uma vez que a diferença numérica entre elas é imperceptível nesta escala.

meira subbanda, i.e., tomando como sendo nulo o acoplamento com a segunda subbanda de mais baixa energia.

## **CAPÍTULO 8**

### CONCLUSÕES

### 8.1 Conclusões do trabalho

Nesta dissertação, investigamos a relaxação de spin dos elétrons de condução em poços quânticos com duas sub-bandas crescidos ao longo das direções [001] e [110] via o mecanismo de D'yakonov-Perel'. Mais especificamente, nós incluímos a contribuição da segunda subbanda nos tempos de relaxação, contribuição esta nunca antes calculada. Dessa maneira, foi necessário a derivação analítica das expressões que representam estas contribuições. O tempo de relaxação do spin via mecanismo de D'yakonov-Perel' necessita dos Hamiltoniano efetivos 2DEGs que levam em conta o acoplamento intersub-banda via Hamiltonianos de Rashba e Dresselhaus para duas diferentes direções de crescimento. Uma vez que estes Hamiltonianos nunca foram derivados antes, os derivamos aqui, utilizando para isso uma combinação de teoria de grupos, método k.p., aproximação da função envelope e teoria de perturbação de Löwdin. Dessa maneira, temos como principais resultados desta dissertação os Hamiltonianos efetivos (direções [001] e [110]) 2DEg que levam em conta a influência da segunda sub-banda, e o tempo de relaxação do spin do elétron calculado a partir destes.

A fim de ilustrarmos a influência da segunda sub-banda, simulamos poços quânticos realísticos, e constatamos que para os parâmetros escolhidos por nós, esta contribuição

é pequena. Além deste resultado, também obtivemos maiores tempos de relaxação de spin para a direção [110] quando comparado à direção [001], o que está de acordo com resultados experimentais na literatura.<sup>9,10</sup>

Sugerimos como proposta de extensão à este projeto, uma análise mais sistemática das contribuições nos tempos de relaxação afim de tentar encontrar sistemas onde esta contribuição da segunda sub-banda seja maior. Para isto utilizando uma maior gama de materiais, concentrações eletrônicas, e voltagens aplicadas. Além da busca por diferente sistemas, investigaremos também outros mecanismos de relaxação afim de constatarmos a contribuição destes ao tempo de relaxação.

## REFERÊNCIAS

1 DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, v. 56, n. 7, p. 665–667, 1990. DOI: 10.1063/1.102730.

2 LOSS, D.; DIVINCENZO, D. P. Quantum computation with quantum dots. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 57, n. 1, p. 120–126, Jan. 1998.

3 LOSS, D.; AWSCHALOM, D. D.; N., S. Semiconductor spintronics and quantum computation. Berlin: Springer, 2002.

4 FABIAN, J.; AL. et. Semiconductor spintronics. *Acta Physica Slovaca*, v. 57, p. 565–907, Aug. 2007.

5 BERNARDES, E. et al. Spin-orbit interaction in symmetric wells with two subbands. *Physical Review Letters*, v. 99, n. 7, p. 076603, Aug. 2007. DOI: 10.1103/Phys-RevLett.99.076603.

6 D'YAKONOV, M. I.; PEREL', V. I. Spin relaxation of conduction electrons in noncentrosymmetric semiconductors. *Soviet Physics – solid state*, v. 13, n. 12, p. 3023–3026, 1972.

7 NESTOKLON, M. O. et al. Spin splitting of electron states in (110) quantum wells: Symmetry analysis and k·p theory versus microscopic calculations. *Physical Review B*, v. 85, n. 20, p. 205307, May. 2012. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.205307.

8 KAINZ, J.; RÖSSLER, U.; WINKLER, R. Temperature dependence of D'yakonov-Perel'

spin relaxation in zinc-blende semiconductor quantum structures. *Physical Review B*, v. 70, n. 19, p. 195322, Nov. 2004. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.195322.

9 OHNO, Y. et al. Spin relaxation in GaAs (110) quantum wells. *Physical Review Letters*, v. 83, p. 4196–4199, Nov. 1999.

10 KARIMOV, O. Z. et al. High temperature gate control of quantum well spin memory. *Physical Review Letters*, v. 91, p. 246601, 2003. DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.246601.

11 LEE, M. et al. Spin hall effect due to intersubband-induced spin-orbit interaction in symmetric quantum wells. *Physical Review B*, v. 80, n. 15, p. 155314, Oct. 2009. DOI: 10.1103/PhysRevB.80.155314.

12 ŽUTIĆ, I.; FABIAN, J.; SARMA, S. D. Spintronics: fundamentals and applications. *Review of Modern Physics*, v. 76, n. 2, p. 323–410, Apr. 2004. DOI: /10.1103/Rev-ModPhys.76.323.

13 AVERKIEV, N. S. et al. Spin-relaxation anisotropy in asymmetrical (001)  $Al_xGa_{1-x}As$  quantum wells from hanle-effect measurements: relative strengths of rashba and dresselhaus spin-orbit coupling. *Physical Review B*, v. 74, n. 3, p. 033305, 2006. DOI: 10.1103/PhysRevB.60.15582.

14 TARASENKO, S. A. Spin relaxation of conduction electrons in (110)-grown quantum wells: A microscopic theory. *Physical Review B*, v. 80, n. 16, p. 165317, Oct. 2009. DOI: 10.1103/PhysRevB.80.165317.

15 AVERKIEV, N. S.; GOLUB, L. E. Spin relaxation anisotropy: microscopic mechanisms for 2d systems. *Semiconductor Science and Technology*, v. 23, n. 11, p. 4002, 2008. DOI: 1242/23/11/114002.

16 AVERKIEV, N. S.; GOLUB, L. E. Giant spin relaxation anisotropy in zinc-blende heterostructures. *Physical Review B*, v. 60, n. 23, p. 15582–15584, 1999. DOI: 10.1103/Phys-RevB.60.15582.

17 KORALEK, J. D. et al. Emergence of the persistent spin helix in semiconductor quantum wells. *Nature*, v. 458, p. 610–613, Apr. 2009. DOI:10.1038/nature07871.

18 BEL'KOV, V. V. et al. Symmetry and spin dephasing in (110)-grown quantum wells. *Physical Review Letters*, v. 100, p. 176806, 2008. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.176806.

19 BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *Science*, v. 314, n. 5806, p. 1757–1761, 2006.

20 DRESSELHAUS, G.; KIP, A. F.; KITTEL, C. Spin-orbit coupling effects in zincblende structures. *Physical Review*, v. 98, n. 2, p. 368, Apr. 1955.

21 VURGAFTMAN, I.; MEYER, J. R.; RAM-MOHAN, L. R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 89, n. 11, p. 5815–5875, 2001.

22 SHANKAR, R. Principles of quantum mechanics. New York: Plenum Press, 1994.

23 SAKURAI, J. J. Modern quantum mechanics. Boston: Addison-Wesley, 2011.

24 COHEN-TANNOUDJI, C. Quantum mechanics. New York: Wiley, 1977.

25 GASIOROWICZ, S. Quantum physics. Hoboken, New Jersey: Wiley, 2003.

26 RINDLER, W. *Relativity:* special, general, and cosmological. New York: Oxfordy University Press, 2006.

27 SAKURAI, J. J. *Advanced quantum mechanics*. Menlo Park, Calif.: Benjamin/Cummings, 1967.

28 DIRAC, P. A. M. *The principles of quantum mechanics*. Oxford: Oxford Clarendon, 1947.

29 CALLAN, J. C. G. *Introduction to relativistic quantum mechanics*. Princeton: Princeton University Press, 1996.

30 GREINER, W. *Relativistic quantum mechanics:* wave equations. Berlin: Springer, 2000.

31 JACKSON, J. D. Classical electrodynamics. 3rd ed. New York: John Willey, 1999.

32 GOLDSTEIN, H.; POOLE, C.; SAFKO, J. *Classical mechanics*. San Francisco: Addison Wesley, 2002.

33 FETTER, A. L.; WALECKA, J. D. *Theoretical mechanics of particles and continua*. Mineola: Dover, 2003.

34 ASHCROFT, N.; MERMIN, N. Solid state physics. Berlin: Springer, 2008.

35 CALSAVERINI, R. S. et al. Intersubband-induced spin-orbit interaction in quantum wells. *Physical Review B*, v. 78, n. 15, p. 155313, 2008. DOI:10.1103/PhysRevB.73.205341.

36 LöWDIN, P. A note on the quantum-mechanical perturbation theory. *The Journal of Chemical Physics*, AIP, v. 19, n. 11, p. 1396–1401, 1951.

37 BIR, G.; PIKUS, G. *Symmetry and strain-induced effects in semiconductors*. New York: John Wiley, 1974. 484 p.

38 WINKLER, R. *Spin-orbit couplin effects in two-dimensional electron and hole systems.* Berlin: Springer, 2003.

39 KANE, E. O. Energy band structure in p-type germanium and silicon. *Journal of Physics and Chemistry of Solids.*, v. 1, n. 1–2, p. 82–99, 1956.

40 LUTTINGER, J. M.; KOHN, W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Physical Review*, v. 97, n. 4, p. 869–883, 1955.

41 DRESSELHAUS, G.; KIP, A. F.; KITTEL, C. Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals. *Physical Review*, v. 98, n. 2, p. 368–384, 1955.

42 NOVIK, E. G. et al. Band structure of semimagnetic  $Hg_{1-x}Mn_xTe$  quantum wells. *Physical Review B*, v. 72, n. 3, p. 035321, Jun. 2005. Disponível em: <a href="http://arxiv.org/pdf/cond-mat/0409392v1.pdf">http://arxiv.org/pdf/cond-mat/0409392v1.pdf</a>>. Acesso em: 21 jun. 2013.

43 DRESSELHAUS, G. Spin-orbit coupling effects in zincblende structures. *Physical Review*, American Physical Society, v. 100, n. 2, p. 580–586, 1955.

44 HASAN, M. Z.; KANE, C. L. *Colloquium* : topological insulators. *Review of Modern Physics*, v. 82, n. 4, p. 3045–3067, Nov. 2010. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.3045.

45 KöNIG, M. et al. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, v. 318, n. 5851, p. 766–770, 2007. DOI: 10.1126/science.1148047.

46 BURT, M. G. The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures. *Journal of Physics: condensed matter*, v. 4, n. 32, p. 6651, 1992. DOI:10.1088/0953-8984/4/32/003.

47 BURT, M. G. An exact formulation of the envelope function method for the determination of electronic states in semiconductor microstructures. *Semiconductor Science and Technology*, v. 2, n. 7, p. 460, 1987. DOI:10.1088/0268-1242/2/7/012.

48 BURT, M. G. A new effective-mass equation for microstructures. *Semiconductor Science and Technology*, v. 3, n. 12, p. 1224, 1988. DOI:10.1088/0268-1242/3/12/013.

49 BURT, M. G. An exact formulation of the envelope function method for the determination of electronic states in semiconductor microstructures. *Semiconductor Science and Technology*, v. 3, n. 8, p. 739, 1988. DOI: 10.1088/0268-1242/3/8/003.

50 FARIA JUNIOR, P. E. *Nanowhiskers politípicos – uma abordagem teórica baseada em teoria de grupos e no método k.p.* 2012. 138 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

51 CALSAVERINI, R. S. P. A. *Acoplamento spin-oŕbita inter-subbanda em heteroestruturas semiconductoras.* 2007. 97 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007. 52 SAMARA, G. A. Temperature and pressure dependences of the dielectric constants of semiconductors. *Physical Review B*, v. 27, n. 6, p. 3494–3505, 1983.

53 DRESSELHAUS, M. S.; DRESSELHAUS, G.; JORIO, A. *Group theory, application to the physics of condensed matter.* Berlin: Springer, 2008.

54 REIF, F. *Fundamentals of statistical and thermal physics*. New York: McGraw-Hill, 1965.

55 BOROSS, P. et al. A unified theory of the Elliott-Yafet and the D'yakonov-Perel' spin-relaxation mechanisms. 2012. DOI: 10.1021/nl401205b. Disponível em: <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/nl401205b>. Acesso em: 21 jun. 2013.

56 ARFKEN, G.; WEBER, H.; HARRIS, F. *Mathematical methods for physicists. 6th ed.* Waltham, Massachusetts: Elsevier Science, 2005.

57 WALSER, M. P. et al. Direct mapping of the formation of a persistent spin helix: supplementary information. *Nature Physics*, v. 8, p. 757–762, Aug. 2012. DOI: 10.1038/na-ture07871.

58 CHALAEV, O. Matrices, bases and matrix elements for cubic double crystallographic groups. Jun. 2012. Disponível em: <a href="http://arxiv.org/pdf/1206.0292v3.pdf">http://arxiv.org/pdf/1206.0292v3.pdf</a>). Acesso em: 21 jun. 2013.

59 ELDER, W. J.; WARD, R. M.; ZHANG, J. Double-group formulation of k.p theory for cubic crystals. *Physical Review B*, v. 83, n. 16, p. 165210, 2011. DOI: 10.1103/Phys-RevB.83.165210.

60 CARTOIXÀ, X. et al. Higher-order contributions to rashba and dresselhaus effects. *Physical Review B*, v. 73, n. 20, p. 205341, 2006. DOI:10.1103/PhysRevB.73.205341.

61 FAZZIO, A.; WATARI, K. *Introdução a teoria de grupos:* aplicada em moléculas e solidos. Santa Maria: UFSM, 2009.

## APÊNDICES
## **APÊNDICE A**

# BREVE REVISÃO DE TEORIA DE GRUPOS APLICADA AO ESTUDO DE SEMICONDUCTORES

Em 1913, experimentos de Raio-X realizados por W. e L. Bragg confirmaram que os cristais, arranjam-se em estruturas que possuem certas simetrias, como por exemplo: simetria de translação, rotação, reflexão e inversão. Utilizando Teoria de Grupos, conseguimos via tais simetrias do cristal, reduzir e simplificar o estudo do nosso problema. Como exemplo, o Teorema de Bloch,<sup>34</sup> que utiliza a simetria de translação do vetor da rede de Bravais,  $\vec{R}$ , para reduzir o cálculo da função de onda no cristal inteiro para apenas a região da célula unitária, já que deste segue  $u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$ .

A principal motivação para a construção deste capítulo é que a teoria de grupos se mostra de uso indispensável ao método k.p (método mostrado e discutido no capítulo 3), pois utilizando-a torna-se possível conectar diferentes elementos de matriz, como veremos.

### A.1 Estrutura cristalina zincblende e suas simetrias

Nessa dissertação, nos restringiremos aos átomos que cristalizam na forma Zincblende, formada na maioria das vezes por átomos das colunas III-V e/ou II-IV da tabela periódica. Esta estrutura pode ser descrita por exemplo por uma célula de rede cúbica de face centrada com uma base de dois átomos diferentes, o primeiro localizado em 0 e o segundo em  $\frac{a}{4}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$ . Tal estrutura vem representada pela Fig. (A.1).



Figura A.1 – Estrutura cristalina Zincblende com os eixos  $\hat{x}, \hat{y} \in \hat{z}$  paralelos respectivamente às direções cristalográficas [001], [010] e [001].

Observando atentamente a Fig. (A.1), vemos que cada átomo do cristal é cercado por quatro vizinhos mais próximos formando assim um tetraedro, como mostra a Fig. (A.2). Devido a essa característica, o grupo espacial da célula Zincbledadasnde (Fig. A.1) é chamado grupo do tetraedo, o  $T_d^2$ , onde usamos aqui, a notação de Schoenflies. As simetrias translacionais são relacionadas aos três vetores primitivos da rede de Bravais. Seu grupo pontual (operações mantendo ao menos um ponto do cristal fixo) contém 24 operações de simetria, dados por

$$T_d = \{E, 8C_3, 3C_2, 6S_4, 6\sigma_d\}$$
 (A.1)

Aqui, entende-se por operações de simetrias, operações que retornam o cristal a uma configuração geométrica equivalente daquela anterior a aplicação da operação. A tabela de caractere deste grupo pontual é dada pela Tab. A.1.



Figura A.2 – Vizinhos próximos de um átomo em uma estrutura cristalina de Zincblende.

	Ε	8 <i>C</i> <sub>3</sub>	3 <i>C</i> <sub>2</sub>	6 <i>S</i> <sub>4</sub>	$6\sigma_d$		
Γ <sub>1</sub>	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2 + z^2$
Γ <sub>2</sub>	1	1	1	-1	-1		
Γ <sub>3</sub>	2	-1	2	0	0		$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
$\Gamma_4$	3	0	-1	1	-1	$(R_x, R_y, R_z)$	
$\Gamma_5$	3	0	-1	-1	1	(x, y, z)	(xy, xz, yz)

Tabela A.1 – Tabela de caractere para o grupo simples  $T_d$ .

A primeira operação (*E*) é a identidade. A segunda (*C*<sub>3</sub>) é composto pelas rotações de  $\frac{2\pi}{3}$  no sentido horário e anti-horário em torno dos eixos [111], [111], [111] e [111], identificado na Fig. (A.3) pelos eixos amarelos. A terceira (*C*<sub>2</sub>), são as rotações de  $\pi$  em torno dos eixos [100], [010] e [001], identificado pelos eixos azuis. A quarta (*S*<sub>4</sub>) representa as rotações impróprias, rotações de  $\frac{\pi}{2}$  em torno dos eixos [100], [010] e [001], seguido de uma reflexão em um plano perpendicular ao eixo de rotação escolhido. Estes por sua vez, são identificados pelos cubos vermelhos e brancos. A ultima operação ( $\sigma_d$ ) é composto pelas reflexões com respeito aos planos (110), (110), (101), (101), (011) e (011), identificado pelos planos azuis que interseccionam o cubo.

Dessa maneira, quando aplicamos ao cristal as 24 operações de simetrias, conseguimos verificar que todas operações o deixam invariante. No entanto, quando fazemos a verificação de que ambas operações deixam nossa estrutura invariante (geometricamente equivalente), esquecemos de tratar a parte spinorial das funções de onda dos átomos, o que causa notáveis diferenças. Como se sabe, esta discrepância se deve ao diferente comportamento das funções de onda orbitais e spinoriais via atuação de operadores. Por



Figura A.3 – Simetrias. <http://azufre.quimica.uniovi.es/d-MolSym> Acesso em Fev. 2012

exemplo, ao pegarmos uma função de onda orbital e rodarmos ela por  $2\pi$  em volta de um eixo qualquer, é evidente que a função de onda orbital da partícula vai voltar exatamente ao mesmo estado que estava anteriormente. No entanto, quando pegamos uma partícula com spin 1/2 e aplicamos a mesma rotação, representado por

$$R_{\hat{h}}(\phi) = e^{-\frac{i\vec{S}\cdot\hat{h}\phi}{\hbar}}, \qquad (A.2)$$

onde escolhemos os mesmos angulos e eixos de rotação que no caso da função de onda orbital ( $\phi = 2\pi$  e  $\hat{n} = \hat{z}$ ), obtemos

$$e^{-\frac{iS_{z}2\pi}{\hbar}}|X\rangle = -\mathbf{1}_{2\times 2}|X\rangle = -|X\rangle.$$
(A.3)

Ou seja, nota-se aqui uma grande diferença entre rodar por  $2\pi$  a função de onda orbital e a spinorial, uma vez que o estado final spinorial ganha um sinal de menos em relação ao seu estado inicial. Diferença essa, crucial na escolha do grupo pontual. Se resolvemos ignorar essa característica provinda da função de onda do spin 1/2, utilizaremos o formalismo do grupo simples  $T_d$ , passando assim a tratar o spin do elétron como uma perturbação do problema. Dessa maneira, o Hamiltoniano para as funções de Bloch do nosso sistema passa a ser dividido da seguinte maneira

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r})}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{p} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})] \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \left[\vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})\right]}_{\mathcal{H}'}.$$
 (A.4)

No entanto, caso estejamos interessados em incluir exatamente o comportamento do spin na abordagem do nosso problema, devemos escolher o grupo duplo  $T_d \otimes D_{1/2}$ , onde  $D_{1/2}$  é um elemento da representação SU(2). Nesse caso, a divisão do nosso Hamiltoniano perturbado e não perturbado é dada por

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{p} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})] \cdot \vec{\sigma}}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \left[\vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})\right]}_{\mathcal{H}'}, \quad (A.5)$$

Aqui, o leitor não deve se preocupar com a derivação de ambos Hamiltonianos A.4 e A.5, uma vez que esta será feita no capítulo que se sucede.

Deve-se frizar que caso seja escolhido o grupo duplo, as operações de simetria descritas em Tab. (A.1) devem ser revistas e mudadas, visto que agora, não devemos só analisar a função de onda orbital via operações de tais elementos como também as funções de onda spinorial dos elétrons.

Devido a maior simplicidade na dedução matemática do Hamiltoniano e a concordância com resutados experimentais, a maioria dos pesquisadores que trabalham com o método  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  utilizam o grupo simples. No entanto, também existem artigos publicados cujo os autores usam a formulação do grupo duplo.<sup>58–60</sup> Nos dois ultimos artigos citados, os autores nos mostram as diferenças na obtenção dos Hamiltoniano em ambas formulações.

### A.2 Estrela de $\vec{k}$ e o grupo do vetor de onda

Neste trabalho, abordaremos a formulação do grupo simples já que esta se mostra suficiente para nossos propósitos. Com isso, fala-se que o spin, representado pelo grupo  $D_{1/2}$ , será tratado como uma perturbação do nosso sistema. Sendo assim, a equação de

autovalores do nosso sistema não perturbado é

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r})\right)\psi_{n,\vec{k}} = E_{n,\vec{k}}\psi_{n,\vec{k}} .$$
(A.6)

Onde  $V(\vec{r})$  é o potencial da rede de Bravais, que respeita a periodicidade  $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$ , com  $\vec{R}$  sendo o vetor de formação da rede de Bravais. Aqui, o índice *n* faz referência as bandas de energia. Aplicando em A.6 o operador de translação, responsável pela transformação  $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{R}$ , vemos que essa equação de autovalores é invariante perante tal operação. Sendo assim, podemos utilizar o teorema de Bloch para um sólido de volume V, cujo resultado é

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) , \qquad (A.7)$$

sendo  $u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}).$ 

Aplicando então o resultado desse teorema (dado pela equação A.7) na equação A.6, obtemos

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\cdot\vec{p}\right)u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \left(E_{n,\vec{k}} - \frac{\hbar^2k^2}{2m_0}\right)u_{n,\vec{k}}(\vec{r}).$$
(A.8)

Uma vez que já utilizamos o teorema de Bloch para restringirmos ao cálculo na célula unitária, não precisamos mais nos preocupar com as simetrias de translação. Sendo assim, introduzimos agora o grupo fator, um subgrupo do grupo espacial  $T_d$ , representado por  $T_d^f$ . Sabemos que para a estrutura Zincblende os elementos do grupo fator são os mesmos elementos do grupo pontual.

A aplicação de uma operação em uma função é tal que

$$g\mathcal{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \mathcal{H}_{\vec{k}}(g^{-1}\vec{r}) , \qquad (A.9)$$

ou seja, quando aplicamos qualquer operação  $g \in T_d^f$ , no Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{\vec{k}}(\vec{r})$ , obtemos

$$g\mathcal{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(g^{-1}\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k}\cdot\left(g^{-1}\vec{p}\right)\right].$$
 (A.10)

Utilizando agora a relação

$$\left(g\vec{A}\right)\cdot\vec{B}=\vec{A}\cdot\left(g^{-1}\vec{B}\right)$$
, (A.11)

e lembrando que  $V(\vec{r})$  é invariante perante g, obtemos

$$g\mathcal{H}_{\vec{k}}(\vec{r}) = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0}\left(g\vec{k}\right) \cdot \vec{p}\right].$$
 (A.12)

Sendo assim, vemos pela equação A.12 que a igualdade  $g\mathcal{H}_{\vec{k}} = \mathcal{H}_{\vec{k}}$  só será verdadeira quando g, satisfizer a relação

$$g\vec{k} = \vec{k} . \tag{A.13}$$

O conjunto de vetores  $\vec{k'}$ , gerados pela aplicação de g sobre  $\vec{k}$ , recebe o nome de *estrela*  $de \ \vec{k}$ . Já o conjunto das operações g que mantém a equação A.13 satisfeita é chamado de *little group*. Esse resultado é discutido em<sup>37,53,61</sup>. Lembrando agora que dois vetores  $\vec{k}$  são ditos equivalentes quando suas funções de onda,  $\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ , tem o mesmo caractere da representação irredutível e satisfazem as mesmas condições de contorno, obtemos

$$E_{\vec{k}} = E_{\vec{k}+\vec{K}}$$
 (A.14)

Com esse resultado, podemos escrever  $E_{\vec{k}} \to E(\vec{k})$ , sendo  $E(\vec{k})$  uma função multívoca cujo domínio se restringe a primeira zona de Brillouin. Como o interesse neste trabalho são as energias do nosso sistema, podemos extender A.13 usando A.14, o que nos dá

$$g\vec{k} = \vec{k} + \vec{K} . \tag{A.15}$$

Devido ao acréscimo de um vetor da rede recíproca em A.13, o grupo pontual que satisfaz a igualdade A.13 ganha novos elementos, sendo chamado agora de *grupo do vetor de onda k*. Pode-se concluir aqui que a ação do grupo espacial, inicialmente na posição, foi transferida para o espaço recíproco, onde o termo  $\frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{p}}{m_0}$ , obtido via aplicação do teorema de Bloch no Hamiltoniano inicial, reduz a simetria de  $\mathcal{H}$  (grupo espacial  $T_d$ ) para o *grupo do vetor de onda k*.

Em spintrônica de semicondutores, o estudo de maior interesse é sobre os semicondutores de *gap* direto, onde a transição eletrônica da banda de condução para a de valência (e vice-versa) só libera (abosrve) energia na forma de luz, enquanto que em semicondutores de *gap* indireto além da liberação de fótons, há também a liberação de fônons, responsáveis pelo aquecimento do material. Em nosso caso, os materiais de *gap* direto estudados tem os extremos de suas bandas de condução e valência alinhadas em  $\vec{k} = \vec{0}$ , ou seja, o vetor de onda esta centrado na zona de Brillouin.

Devido aos argumentos dados acima utilizaremos o ponto  $\vec{k} = \vec{0}$  como o ponto de expansão das funções de Bloch para nosso sistema não perturbado. Substituindo o ponto escolhido em A.13, temos

$$g\vec{0} = \vec{0}$$
 , (A.16)

relação esta que é satisfeita  $\forall g \in T_d^f$ . Lembrando que para os cristais abordados nessa dissertação possuem estrutura zincblende, o grupo fator é igual ao grupo pontual de mais alta simetria ( $\Gamma$ ), provamos que o grupo que satisfaz A.16 é o grupo pontual  $T_d$ .

### A.3 Regras de seleção e o cálculo dos elementos de matriz

A Teoria de Grupos é uma grandiosa ferramenta matemática no ramo da matéria condensada, nos auxiliando nos cálculos via conhecimento das simetrias dos cristais. Aplicaremos agora este conhecimento no cálculo dos elementos de matriz de um certo Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  sobre uma base { $|\psi_i\rangle$ } onde i = 1, ..., N. Aqui, fazemos uso de um teorema de extrema importância, enunciado abaixo.<sup>37,53,61</sup>

Se a função  $F_i(\vec{r})$  se transforma como uma das funções de base da representação irredutível  $D_{\mu}$ , a integral

$$\int d\vec{r} F_i(\vec{r}) , \qquad (A.17)$$

é não nula somente quando  $D_{\mu}$  é a representação irredutível identidade,  $D_0$ . Escrevendo então  $F_i(\vec{r})$  como produto de 3 funções,  $\psi_i^{\alpha}(\vec{r}) \mathcal{H}(\vec{r}) \psi_j^{\beta}(\vec{r})$ , onde estas, se transformam respectivamente como as funções de bases das irrepresentações irredutíveis  $D_{\alpha}$ ,  $D_{\gamma}$ ,  $D_{\beta}$ , reescrevemos a integral

$$\left\langle \psi_{i}^{\alpha} \left| \mathcal{H} \right| \psi_{j}^{\beta} \right\rangle = \int d\vec{r} \psi_{i}^{\alpha*}(\vec{r}) \mathcal{H}(\vec{r}) \psi_{j}^{\beta}(\vec{r}) , \qquad (A.18)$$

Utilizando o teorema acima, concluimos que a integral A.17 só poderá ser não nula quando o produto das irrepresentações irredutíveis,

$$D_{\alpha} \otimes D_{\gamma} \otimes D_{\beta} = nD_0 + \sum_{i \neq 0} a_i D_i$$
, (A.19)

contiver a representação irredutível identidade,  $D_0$ , implicando em  $n \neq 0$ . Caso o produto contenha a representação irredutível, o número de elementos de matriz independente será a multiplicidade de  $D_0$ , ou seja, n.

Nesse ponto, é necessário introduzirmos a tabela de produto das irrepresentações do grupo simples  $T_d$ , dada por Tab. A.2.

Como discutido anteriormente, trataremos os semiconductores ao redor do ponto  $\Gamma$  $(\vec{k} = \vec{0})$ . Nesse ponto, as funções de Bloch do cristal sempre se transformam como os vetores de base das representações irredutíveis do grupo pontual  $T_d$ . Devido a essa característica, nomeamos as representações irredutíveis como sendo  $\Gamma_i$ . A partir de agora, trocamos  $D_i$  por  $\Gamma_i$  já que nessa dissertação, abordaremos somente o grupo pontual  $\Gamma$ .

$\otimes$	Γ <sub>1</sub>	$\Gamma_2$	Γ <sub>3</sub>	$\Gamma_4$	Γ <sub>5</sub>
Γ <sub>1</sub>	Γ <sub>1</sub>	$\Gamma_2$	Γ <sub>3</sub>	Γ <sub>4</sub>	Γ <sub>5</sub>
Γ <sub>2</sub>		Γ <sub>1</sub>	Γ <sub>3</sub>	Γ <sub>5</sub>	Γ <sub>4</sub>
Γ <sub>3</sub>			$\Gamma_1 \oplus \Gamma_2 \oplus \Gamma_3$	$\Gamma_4 \oplus \Gamma_5$	$\Gamma_4\oplus\Gamma_5$
$\Gamma_4$				$\Gamma_1 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5$	$\Gamma_2 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5$
$\Gamma_5$					$\Gamma_1 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5$

Tabela A.2 – Tabela do produto direto entre as representações irredutíveis do grupo simples  $T_d$ 

### A.3.1 Representações matriciais das operações de simetria

Em física da matéria condensada, as bandas de maior interesse são a banda de condução de mais baixa energia e a banda de valência de mais alta energia. Via cálculos *ab-initio*, tight-binding e experimentos, conseguimos identificar as simetrias das bandas de energia, resultado esse discutido em.<sup>50</sup> Para a banda de condução (valência) de mais baixa (alta) energia, encontramos que as funções de Bloch se transformam como os vetores da representação irredutível  $\Gamma_1$  ( $\Gamma_5$ ). Utilizando a Tab. (A.1), tabela de caractere do grupo pontual, vemos que a função de Bloch possue simetria esférica (tipo p) e por isso, utilizaremos  $|S\rangle$  ( $|X\rangle$ , $|Y\rangle$  e  $|Z\rangle$ ) para denotar o(s) seu autovetor(es). Como estamos trabalhando com a formulação do grupo simples, o "spin" não aparece naturalmente nas funções de base/função de onda. Sendo assim, temos que colocá-lo com a mão a dependência deste na função de onda, ou seja, temos que fazer o produto de Kronecker (representado por  $\otimes$ ) entre  $|S\rangle$ ,  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$ ,  $|Z\rangle$  e  $|\uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$ , nos dando os autovetores

$$|S\rangle \otimes |\uparrow\rangle, |X\rangle \otimes |\uparrow\rangle, |Y\rangle \otimes |\uparrow\rangle, |Z\rangle \otimes |\uparrow\rangle, |S\rangle \otimes |\downarrow\rangle, |X\rangle \otimes |\downarrow\rangle, |Y\rangle \otimes |\downarrow\rangle, |Z\rangle \otimes |\downarrow\rangle,$$
(A.20)

podendo ser simplificado como

$$|S\uparrow\rangle, |X\uparrow\rangle, |Y\uparrow\rangle, |Z\uparrow\rangle, |S\downarrow\rangle, |X\downarrow\rangle, |Y\downarrow\rangle, |Z\downarrow\rangle$$
(A.21)

Achado a base de maior interesse físico, dada por A.21, iremos calcular os elementos de matriz do nosso Hamiltoniano A.8. Como dito anteriormente, colocamos o spin como perturbação do nosso problema sendo assim, devemos somar termos perturbativos dependentes do spin em A.8, termos estes proveniente da aplicação do Teorema de Bloch no Hamiltoniano Spin-Órbita 2.1. Realizando esse procedimento, obtemos

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r})}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\vec{p} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})] \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \left[\vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})\right]}_{\mathcal{H}'}.$$
 (A.22)

A idéia aqui é apenas elucidar como se dá a derivação dos elementos de matriz utilizando teoria de grupos. Sendo assim, não derivaremos todos os elementos de matriz do nosso Hamiltoniano, nos preocupando apenas com os elementos correspondentes ao Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r})}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}[\vec{p} \times \vec{\nabla}V(\vec{r})] \cdot \vec{\sigma} + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k} \cdot \vec{p}}_{\mathcal{H}'}, \quad (A.23)$$

projetado na base A.21, podendo ser encontrado em.<sup>35</sup>

O material matemático mais importante e necessário para progredir com a derivação dos nossos elementos de matriz são as representações matriciais (nas representações irredutíveis) dos nossos elementos de simetriam. Tais representações são escritas como  $[D(\Gamma_j)]_{ii}$ , dessa maneira temos

$$g\left|\Gamma_{j}\left(i\right)\right\rangle = \sum_{l} \left[D\left(\Gamma_{j}\right)\right]_{il}\left|\Gamma_{j}\left(l\right)\right\rangle,\tag{A.24}$$

onde  $|\Gamma_j(i)\rangle$  representa o i-ésimo vetor de base da representação irredutível  $\Gamma_j$ , representado pelas duas ultimas colunas da Tab. (A.1).

Usando (A.24), vemos que cada um dos 24 elementos de simetria do grupo pontual  $T_d$ , mostrados em Tab. (A.1) possui 5 representações matriciais, correspondentes as 5 representações irredutíveis:  $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4, \Gamma_5$ .

De acordo com a Fig. (A.1), vemos que a definição do nosso eixo cartesiano é tal que o eixo  $\hat{z}$  está paralelo a direção cristalográfica [001]. Fixado nosso eixo cartesiano, torna-se possível identificar as simetrias dos cristais como operações matemáticas em funções deste. Como consequência, conseguimos escrever matematicamente a ação dos elementos de simetrias sobre vetores das representações irredutíveis. Sabendo que a ação dos elementos de simetria mudam de acordo com a nossa escolha do eixo. Espera-se que o Hamiltoniano também possa mudar, uma vez que são os elementos de simetria que relacionam diferentes elementos de matriz do nosso Hamiltoniano.

Os Hamiltonianos derivados neste capítulo, no capítulo 3 e no 4, usam sempre o eixo  $\hat{z}$  na direção cristalográfica [001], de forma que não usaremos o índice [001] afim de não carregar muita notação. Sendo assim, quando formos falar de Hamiltonianos com  $\hat{z}$  em uma direção diferente da [001], usaremos o Apêndice A.

Utilizando agora os resultados do apêndice D, conseguimos escrever nosso Hamiltoniano A.23 na base A.21, nos dando

Simetria	$ AM_i\rangle$	$ J, m_j\rangle$	Base do Momento Angular Total
$\Gamma_6^c$	$ AM_1\rangle$	1/2, +1/2>	$ iS angle\otimes \uparrow angle$
$\Gamma_6^c$	$ AM_2\rangle$	1/2, -1/2>	$ iS angle\otimes {\downarrow} angle$
$\Gamma_8^c$	$ AM_3\rangle$	3/2, +3/2>	$rac{1}{\sqrt{2}}\left( \left  X \right\rangle + i \left  Y  ight angle  ight) \otimes \left  \uparrow  ight angle$
$\Gamma_8^c$	$ AM_4\rangle$	3/2, +1/2>	$\frac{1}{\sqrt{6}}\left( X\rangle+i Y\rangle\right)\otimes \downarrow\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}} Z\rangle\otimes \uparrow\rangle$
$\Gamma_8^c$	$ AM_5\rangle$	3/2, -1/2>	$-rac{1}{\sqrt{6}}\left( X angle - i Y angle ight)\otimes \!\uparrow angle - \sqrt{rac{2}{3}} Z angle\otimes \!\downarrow angle$
$\Gamma_8^c$	$ AM_6 angle$	3/2, -3/2>	$-rac{1}{\sqrt{2}}\left( X angle-i Y angle ight)\otimes \downarrow angle$
$\Gamma_7^c$	$ AM_7\rangle$	1/2, +1/2>	$\frac{1}{\sqrt{3}}\left( X\rangle + i Y\rangle\right) \otimes  \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} Z\rangle \otimes  \uparrow\rangle$
$\Gamma_7^c$	$ AM_8\rangle$	1/2, -1/2>	$\frac{1}{\sqrt{3}}\left( X\rangle - i Y\rangle\right) \otimes  \uparrow\rangle - +\sqrt{\frac{1}{3}} Z\rangle \otimes  \downarrow\rangle$

Tabela A.3 - Tabela que mostra a base do momento angular total

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_{s} & ik_{x}P & ik_{y}P & ik_{z}P & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -ik_{x}P & E_{\rho} & -i\frac{\Lambda}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\Lambda}{3} \\ -ik_{x}P & i\frac{\Lambda}{3} & E_{\rho} & 0 & 0 & 0 & 0 & -i\frac{\Lambda}{3} \\ -ik_{x}P & 0 & 0 & E_{\rho} & 0 & \frac{\Lambda}{3} & i\frac{\Lambda}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{s} & ik_{x}P & ik_{y}P & ik_{z}P \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\Lambda}{3} & -ik_{x}P & E_{\rho} & i\frac{\Lambda}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\frac{\Lambda}{3} & -ik_{x}P & -i\frac{\Lambda}{3} & E_{\rho} & 0 \\ 0 & \frac{\Lambda}{3} & i\frac{\Lambda}{3} & 0 & -ik_{x}P & 0 & 0 & E_{\rho} \end{pmatrix}.$$
(A.25)

Utilizando o apêndice A, conseguimos reescrever o Hamiltoniano acima na base do momento angular total, descrita em Tab. (A.3). Fazendo isso, obtemos

$$\begin{pmatrix} E_{s} & 0 & -\frac{k_{+}P}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{2}{3}}k_{z}P & \frac{k_{-}P}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & -\frac{k_{-}P}{\sqrt{3}} \\ 0 & E_{s} & 0 & -\frac{k_{+}P}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}}k_{z}P & \frac{k_{-}P}{\sqrt{2}} & -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} \\ -\frac{k_{-}P}{\sqrt{2}} & 0 & E_{s} - E_{g} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}k_{z}P & -\frac{k_{-}P}{\sqrt{6}} & 0 & E_{s} - E_{g} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}k_{z}P & -\frac{k_{-}P}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & E_{s} - E_{g} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{k_{+}P}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & E_{s} - E_{g} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{k_{+}P}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & E_{s} - E_{g} & 0 & 0 \\ -\frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & -\frac{k_{-}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{s} - E_{g} - \Delta & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{s} - E_{g} - \Delta & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{z}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{+}P}{\sqrt{3}} & \frac{k_{+}P}{\sqrt{3$$

onde  $E_g = E_s - E_p - \frac{\Lambda}{3}$ . Vemos portanto que essa base diagonaliza o Hamiltoniano spinórbita. Este Hamiltoniano é conhecido como Hamiltoniano de Kane 8x8<sup>39</sup> e mesmo sendo um Hamiltoniano simples em relação a ordem perturbativa considerada, este ainda se mostra útil na obtenção de novos resultados como é mostrado em.<sup>35</sup>

## **APÊNDICE B**

# MUDANÇA DE BASE E ROTAÇÕES EM UM HAMILTONIANO

Seja  $\mathcal{H}$ , um Hamiltoniano gerérico que descreve nosso sistema. Projetando este em  $|A_i\rangle$ , uma base ortonormal e completa, i.e.,  $\sum_{i=1}^{N} |A_i\rangle \langle A_i| = 1$ , obtemos os elementos de matriz  $\langle A_i | \mathcal{H} | A_j \rangle$ . Sendo  $|B_i\rangle$  uma outra base ortonormal e completa, conseguimos relacionar ambas projeções do Hamiltoniano via equação (B.1),

$$\langle B_{k} | \mathcal{H} | B_{l} \rangle = \sum_{i,j=1}^{N} \langle B_{k} | A_{i} \rangle \langle A_{i} | \mathcal{H} | A_{j} \rangle \langle A_{j} | B_{l} \rangle.$$
(B.1)

Reescrevendo agora (B.1) como um produto matricial, obtemos

$$\langle B_{k} | \mathcal{H} | B_{l} \rangle = \left( \langle B_{k} | A_{1} \rangle \cdots \langle B_{k} | A_{N} \rangle \right) \left( \begin{array}{ccc} \langle A_{1} | \mathcal{H} | A_{1} \rangle \cdots \langle A_{1} | \mathcal{H} | A_{N} \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle A_{N} | \mathcal{H} | A_{1} \rangle \cdots \langle A_{N} | \mathcal{H} | A_{N} \rangle \end{array} \right) \left( \begin{array}{ccc} \langle A_{1} | B_{l} \rangle \\ \vdots \\ \langle A_{N} | B_{l} \rangle \\ (B.2) \end{array} \right)$$

Fazendo o mesmo procedimento para todos os elementos da matriz, obtemos o Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  projetado na base  $|B_i\rangle$ ,

$$\widetilde{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} \langle B_1 | A_1 \rangle & \cdots & \langle B_1 | A_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle B_N | A_1 \rangle & \cdots & \langle B_N | A_N \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle A_1 | \mathcal{H} | A_1 \rangle & \cdots & \langle A_1 | \mathcal{H} | A_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle A_N | \mathcal{H} | A_1 \rangle & \cdots & \langle A_N | \mathcal{H} | A_N \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle A_1 | B_1 \rangle & \cdots & \langle A_1 | B_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle A_N | B_1 \rangle & \cdots & \langle A_N | B_N \rangle \end{pmatrix}$$
(B.3)

Também podemos escrever esse Hamiltoniano como

$$\mathcal{H}_{|B\rangle} = U^{\dagger} \mathcal{H}_{|A\rangle} U, \tag{B.4}$$

.

onde utilizando a definição

$$U \equiv \begin{pmatrix} \langle A_1 | B_1 \rangle & \cdots & \langle A_1 | B_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle A_N | B_1 \rangle & \cdots & \langle A_N | B_N \rangle \end{pmatrix}.$$
(B.5)

O jeito mais comum de representar uma base nova  $(|B_i\rangle)$  é escrevê-lá como combinação linear da base antiga, ou seja

$$|B_i\rangle = \sum_{j=1}^{N} \langle A_j | B_i \rangle |A_j\rangle.$$
(B.6)

Reescrevendo então a equação (B.6) na forma matricial, obtemos

$$\begin{pmatrix} |B_{1}\rangle \\ |B_{2}\rangle \\ \vdots \\ |B_{N}\rangle \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} |A_{1}\rangle \\ |A_{2}\rangle \\ \vdots \\ |A_{N}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle A_{1} | B_{1}\rangle & \langle A_{2} | B_{1}\rangle & \cdots & \langle A_{N} | B_{1}\rangle \\ \langle A_{1} | B_{2}\rangle & \ddots & \vdots \\ \langle A_{1} | B_{N}\rangle & \cdots & \cdots & \langle A_{N} | B_{N}\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |A_{1}\rangle \\ |A_{2}\rangle \\ \vdots \\ |A_{N}\rangle \end{pmatrix}$$

onde conseguimos reconhecer

$$U = T^{T}, \tag{B.8}$$

e consequentemente,

$$\mathcal{H}_{|B\rangle} = T^* \mathcal{H}_{|A\rangle} T^T. \tag{B.9}$$

### **B.1** Mudança de base $|P\rangle \rightarrow |AM\rangle$

Sabendo que a base do momento angular total se relaciona com a base primordial por

$$\begin{pmatrix} |S\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |X\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |Y\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |Z\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |S\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ |S\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ |X\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ |Z\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} |S\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ -\frac{|(X+i|Y)\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |\downarrow\rangle \\ -\frac{|(X+i|Y)\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |\downarrow\rangle \\ -\frac{(|X\rangle+i|Y\rangle)}{\sqrt{6}} \otimes |\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ -\frac{(|X\rangle-i|Y\rangle)}{\sqrt{6}} \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ \frac{(|X\rangle-i|Y\rangle)}{\sqrt{2}} \otimes |\downarrow\rangle \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} (|X\rangle + i |Y\rangle) \otimes |\downarrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |Z\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{pmatrix} ,$$
(B.10)

onde

para obtermos o Hamiltoniano na base do momento angular total, basta aplicarmos a fórmula (B.9), obtendo

$$\mathcal{H}_{|AM\rangle}^{8\times8} = \left(T^{\dagger}\right)^* \mathcal{H}_{|P'\rangle}^{8\times8} \left(T^{\dagger}\right)^T = T^T \mathcal{H}_{|P\rangle}^{8\times8} T^*.$$
(B.12)

### B.2 Mudança de base $|P\rangle \rightarrow |P'\rangle$

Como já dito no apêndice A,

" De acordo com a Fig. (A.1), vemos que a definição do nosso eixo cartesiano é tal que o eixo  $\hat{z}$  está paralelo a direção cristalográfica [001]. Fixado nosso eixo cartesiano, torna-se possível identificar as simetrias dos cristais como operações matemáticas em funções deste. Como consequência, conseguimos escrever matematicamente a ação dos elementos de simetrias sobre vetores das representações irredutíveis. Sabendo que a ação dos elementos de simetria mudam de acordo com a nossa escolha do eixo. Espera-se que o Hamiltoniano também possa mudar, uma vez que são os elementos de simetria que relacionam diferentes elementos de matriz do nosso Hamiltoniano."

Para heteroestruturas, o raciocínio também segue o mesmo. Sabemos que no capítulo 2, a heteroestrutura foi crescida ao longo do eixo  $\hat{z}$ . Sendo assim, dizemos que nossos Hamiltonianos foram derivados para heteroestruturas crescidas ao longo da direção cristalográfica [001].

No entanto, essa é uma escolha totalmente particular, podendo as heteroestruturas serem crescidas em diferentes direções cristalográfica, como por exemplo [110] e [111]. Em algumas direções, essas heteroestruturas, feitas com os mesmos materiais, podem apresentar propriedades interessantes devido à peculiaridades no Hamiltoniano. Isso se dá pois heteroestruturas crescidas em diferentes direções possuem diferentes simetrias. Simetrias essas que por sua vez são totalmente responsáveis pelo surgimento das peculiaridades.

O objetivo dessa seção, é a obtenção do Hamiltoniano de uma heteroestrutura crescido em uma direção arbitrária [abc], utilizando para isso o Hamiltoniano da crescida na direção [001]. Com isso, o primeiro passo a se fazer é voltar ao Hamiltoniano em bulk, obtido fixando o eixo  $\hat{z}$  na direção cristalográfica [001] e obtê-lo novamente, mas agora para o eixo cartesiano  $\hat{z}$  na direção arbitrária [abc]. Obtido o Hamiltoniano em bulk com o eixo  $\hat{z}$  na direção arbitrária [abc], basta seguir o procedimento descrito no capítulo 3 para obtermos o Hamiltoniano de uma heteroestrutura crescido na direção [abc].

Os dois eixos cartesianos ( $\hat{z}$  na direção [001] e na direção [110]) podem ser conectados por uma dupla rotação. A primeira correspondente a uma rotação de  $\phi$  ao redor do eixo  $\hat{z}$ ,

Simetria	$ P_i\rangle$	Base Primordial	$ P_i' angle$	Base Primordial Rodada
Γ <sub>1</sub> <sup>c</sup>	$ P_1\rangle$	$ S angle\otimes \!\!\uparrow angle$	$ P_1' angle$	$ S' angle\otimes {\uparrow'} angle$
$\Gamma_5^{\nu}$	$ P_2\rangle$	$ X angle\otimes \!\!\uparrow angle$	$ P_2' angle$	$ X' angle\otimes \uparrow' angle$
$\Gamma_5^{\nu}$	$ P_3\rangle$	$ Y angle\otimes \!\!\uparrow angle$	$ P_{3}'\rangle$	$ Y' angle\otimes {\uparrow'} angle$
$\Gamma_5^{v}$	$ P_4 angle$	$ Z\rangle\otimes \!\uparrow angle$	$ P_4' angle$	$ Z' angle\otimes \uparrow' angle$
$\Gamma_1^c$	$ P_5 angle$	$ S angle\otimes {\downarrow} angle$	$ P_5' angle$	$ S' angle\otimes {\downarrow'} angle$
$\Gamma_5^{v}$	$ P_6 angle$	$ X angle\otimes {\downarrow} angle$	$ P_6' angle$	$ X' angle\otimes {\downarrow'} angle$
$\Gamma_5^{\nu}$	$ P_7\rangle$	$ Y angle\otimes {\downarrow} angle$	$ P_7' angle$	$ Y' angle\otimes {\downarrow'} angle$
$\Gamma_5^{\nu}$	$ P_8\rangle$	$ Z\rangle\otimes {\downarrow}\rangle$	$ P_8' angle$	$ Z' angle\otimes {\downarrow'} angle$

Tabela B.1 – Tabela que contém as base  $|P_i\rangle$  e  $|P_i'\rangle$ , autoestados de  $\mathcal{H}_0$  em dois diferentes eixos coordenados

 $R_{\hat{z}}^{r}(\phi)$ , e a segunda a uma rotação de  $\theta$  ao redor do eixo  $\hat{y}$ ,  $R_{\hat{y}}^{r}(\theta)$ . Com essa identificação, torna-se possível relacionar as coordenadas de um vetor  $\vec{r}' = (x', y', z')$ , escrito em função do segundo eixo coordenado com as coordenadas do mesmo vetor  $\vec{r} = (x, y, z)$  escrito em função do primeiro eixo coordenado.

A relação entre ambas componentes dos vetores é dada por

$$R_{r}(\theta,\phi) \equiv R_{\hat{g}}^{r}(\theta)R_{\hat{z}}^{r}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos(\theta)\cos(\phi) & \cos(\theta)\sin(\phi) & -\sin(\theta) \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ \cos(\phi)\sin(\theta) & \sin(\theta)\sin(\phi) & \cos(\theta) \end{pmatrix}.$$
(B.13)

Sabendo que  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$  e  $|Z\rangle$ , autoestados do nosso Hamiltoniano  $\mathcal{H}_0$  (escritos usando o primeiro eixo coordenado), se transformam como componentes de vetores e que o *ket*  $|S\rangle$  (também autoestado de  $\mathcal{H}_0$ ) não se altera perante rotações (devido a  $\langle r|S \rangle = f(|r|)$ ), conseguimos reescrever nossos autoestados  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$  e  $|Z\rangle$  como combinações lineares de  $|X'\rangle$ ,  $|Y'\rangle$  e  $|Z'\rangle$ , autoestados de  $\mathcal{H}_0$  usando o segundo eixo coordenado.

Tal relação é dado por

$$\begin{pmatrix} |S'\rangle \\ |X'\rangle \\ |Y'\rangle \\ |Z'\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta)\cos(\phi) & \cos(\theta)\sin(\phi) & -\sin(\theta) \\ 0 & -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ 0 & \cos(\phi)\sin(\theta) & \sin(\theta)\sin(\phi) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |S\rangle \\ |X\rangle \\ |Y\rangle \\ |Z\rangle \end{pmatrix}.$$
(B.14)

No entanto, para relacionar totalmente as bases nos diferentes eixos coordenados mostradas em Tab. (B.1), ainda falta a rotação do spin, dada por<sup>24,27</sup>

$$\begin{pmatrix} |\uparrow'\rangle\\ |\downarrow'\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\phi}{2}}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & e^{\frac{i\phi}{2}}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\\ -e^{-\frac{i\phi}{2}}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & e^{\frac{i\phi}{2}}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle\\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix} = R_{\sigma}(\theta,\phi) \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle\\ |\downarrow\rangle \end{pmatrix}. (B.15)$$

Fazendo o produto de Kronecker entre (B.15) e (B.14), obtemos a relação de  $|P_i\rangle$  com  $|P'_i\rangle$ ,

$$\begin{pmatrix} |S'\rangle \otimes |\uparrow'\rangle \\ |X'\rangle \otimes |\uparrow'\rangle \\ |Y'\rangle \otimes |\uparrow'\rangle \\ |Z'\rangle \otimes |\downarrow'\rangle \\ |X'\rangle \otimes |\downarrow'\rangle \\ |Y'\rangle \otimes |\downarrow'\rangle \\ |Z'\rangle \otimes |\downarrow'\rangle \end{pmatrix} = R(\theta, \phi) \begin{pmatrix} |S\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |X\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |Y\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |Z\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ |X\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ |X\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ |Y\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ |Z\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{pmatrix},$$
(B.16)

onde

$$R(\theta,\phi) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\phi}{2}}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & e^{\frac{i\phi}{2}}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -e^{-\frac{i\phi}{2}}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & e^{\frac{i\phi}{2}}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta)\cos(\phi) & \cos(\theta)\sin(\phi) & -\sin(\theta) \\ 0 & -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ 0 & \cos(\phi)\sin(\theta) & \sin(\theta)\sin(\phi) & \cos(\theta) \\ & (B.17) \end{pmatrix}$$

Com isso, basta utilizarmos a fórmula (B.9) aplicada à  $T = R(\theta, \phi)$ , que obtemos a expressão do Hamiltoniano escrito na nova base primordial,

$$\mathcal{H}_{|P'\rangle} = R(\theta, \phi)^* \mathcal{H}_{|P\rangle} R(\theta, \phi)^T.$$
(B.18)

Sendo assim, independente da orientação do nosso novo eixo coordenado, sabido  $\theta$  e  $\phi$ , sempre conseguimos escrever o Hamiltoniano na nova base primordial, utilizando para isso a equação (B.18).

### B.3 Mudança de base $|AM\rangle \rightarrow |AM'\rangle$

Utilizando os resultados das suas seções anteriores, obtemos

$$\mathcal{H}_{|P'\rangle} = R(\theta, \phi)^* \mathcal{H}_{|P\rangle} R(\theta, \phi)^{T}, \qquad (B.19)$$

e

$$\mathcal{H}_{|AM'\rangle}^{8\times8} = \mathcal{T}^{T} \mathcal{H}_{|P'\rangle}^{8\times8} \mathcal{T}^{*}.$$
(B.20)

Invertendo agora a equação (B.20), obtemos

$$\mathcal{H}_{|P\rangle}^{8\times8} = T^* \mathcal{H}_{|AM\rangle}^{8\times8} T^T, \tag{B.21}$$

Utilizando agora as equações (B.19), (B.20) e (B.21), conseguimos relacionar o Ha-

miltoniano na base do momento angular total com a escolha do primeiro eixo cartesiano com o Hamiltoniano na base do momento angular total com a escolha do segundo eixo cartesiano,

$$\mathcal{H}_{|AM'\rangle}^{8\times8} = T^T R^* T^* \mathcal{H}_{|AM\rangle}^{8\times8} T^T R^T T^*, \qquad (B.22)$$

onde, fazendo a definição

$$\widetilde{U} \equiv T^T R^T T^*, \tag{B.23}$$

obtemos finalmente a equação que transforma nosso Hamiltoniano com o eixo  $\hat{z}$  na direção [001] para  $\hat{z}$  na direção geral [nml]

$$\mathcal{H}^{8\times8}_{|AM'\rangle} = \widetilde{U}^{\dagger} \mathcal{H}^{8\times8}_{|AM\rangle} \widetilde{U}. \tag{B.24}$$

Sabendo que no nosso Hamiltoniano há uma dependência com o vetor de onda  $\vec{k}$ , devemos reescrever as componentes desse vetor em função das componentes no novo eixo cartesiano, relação esta dada por

$$\begin{pmatrix} k_{x} \\ k_{y} \\ k_{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta)\cos(\phi) & \cos(\theta)\sin(\phi) & -\sin(\theta) \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ \cos(\phi)\sin(\theta) & \sin(\theta)\sin(\phi) & \cos(\theta) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} K_{x} \\ K_{y} \\ K_{z} \end{pmatrix}.$$
 (B.25)

### B.4 Rotação de Hamiltoniano via operadores exponenciais

É sabido que se quisermos rodar um Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{|\uparrow(\downarrow)\rangle}$ , projetado na base  $|\uparrow(\downarrow)\rangle$ (spin 1/2) para a base  $|\uparrow'(\downarrow')\rangle$ , via operadores exponenciais e preservando o significado anterior de  $\theta$  e  $\phi$ , devemos utilizar o operador<sup>24,27</sup>

$$\widetilde{U} = e^{-i\frac{S_z}{\hbar}\theta} e^{-i\frac{S_y}{\hbar}\phi}$$
(B.26)

onde utilizamos as matrizes do momento angular 1/2, proporcionais as matrizes de Pauli,

$$S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y \quad e \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$
 (B.27)

em  $|\mathcal{H}_{\uparrow(\downarrow)}
angle$ , ou seja

$$\mathcal{H}^{2\times 2}_{|\uparrow'(\downarrow')\rangle} = \tilde{U}^{\dagger} \mathcal{H}^{2\times 2}_{|\uparrow(\downarrow)\rangle} \tilde{U}$$
(B.28)

De maneira análoga, se quisermos rodar nossa base do momento angular total mostrada na Tabela I, basta aplicarmos

$$\widetilde{U} = e^{-i\frac{\widetilde{J}_{x}}{\hbar}\theta} e^{-i\frac{\widetilde{J}_{y}}{\hbar}\phi}$$
(B.29)

em (C.1) onde seguem as seguintes definições

$$\widetilde{J}_{z} \equiv \hbar \begin{pmatrix} \frac{\sigma_{z}}{2} & 0 & 0\\ 0 & J_{z} & 0\\ 0 & 0 & \frac{\sigma_{z}}{2} \end{pmatrix} e \widetilde{J}_{y} \equiv \hbar \begin{pmatrix} \frac{\sigma_{z}}{2} & 0 & 0\\ 0 & J_{y} & 0\\ 0 & 0 & \frac{\sigma_{z}}{2} \end{pmatrix}$$
(B.30)

sendo

$$J_{z} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \quad e \quad J_{y} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$$
(B.31)

duas matrizes do momento angular j = 3/2. Com isso, conseguimos escrever o Hamiltoniano rodado como sendo o Hamiltoniano da base antiga junto aos operadores exponenciais,

$$\mathcal{H}_{|AM'\rangle}^{8\times8} = e^{i\frac{\widetilde{I}_{y}}{\hbar}\theta} e^{i\frac{\widetilde{I}_{z}}{\hbar}\phi} \mathcal{H}_{|AM\rangle}^{8\times8} e^{-i\frac{\widetilde{I}_{z}}{\hbar}\phi} e^{-i\frac{\widetilde{I}_{y}}{\hbar}\theta}.$$
(B.32)

### **APÊNDICE C**

# OBTENÇÃO DO HAMILTONIANO DRESSELHAUS COM $\hat{Z}$ NA DIREÇÃO [110]

Para conseguir obter os Hamiltonianos com  $\hat{z}$  disposto em uma direção diferente da direção [001], devemos identificar os angulos  $\phi \in \theta$ . A rotação que nos deixa  $\hat{z}$  na direção [110] corresponde à escolha  $\phi = \pi/4$  e  $\theta = \pi/2$ , como é mostrado na Fig. (C.1).



Figura C.1 – Figura que mostra a disposição de dois diferentes eixos coordenados em relação aos eixos cristalográficos. A relação dos eixos coordenados vermelho e azul são relacionados aos eixos cristalográficos via Tab. (C.1).

Existem duas maneiras de se encontrar o Hamiltoniano de Dresselhaus com  $\hat{z}$  na direção cristalográfica [110]. A primeira forma consiste em, a partir do Hamiltoniano  $\mathcal{H}^{[001]}_{|AM\rangle}$  (onde  $\hat{z}$  está na direção [001]), determinar  $\mathcal{H}^{[110]}_{|AM\rangle}$ , onde agora  $\hat{z}$  está na direção [110]. Para isso, basta utilizarmos a equação (C.1) ou equivalentemente a equação (B.32), onde como

Tabela C.1 – Tabela com a orientação dos eixos cartesianos em relação aos eixos cristalográficos para as direções de crescimento [001] e [110].

	Х	у	Z
Direção de crescimento [001]	[100]	[010]	[001]
Direção de crescimento [110]	[001]	[110]	[110]

indicado na figura acima, devemos tomar  $\phi = \pi/4$  e  $\theta = \pi/2$ ,

$$\mathcal{H}^{[110]}_{|AM\rangle} = \tilde{U}^{\dagger}(\phi = \pi/4, \theta = \pi/2) \mathcal{H}^{[001]}_{|AM\rangle} \tilde{U}(\phi = \pi/4, \theta = \pi/2), \tag{C.1}$$

onde aqui, devemos utilizar a equação (B.25) a fim de escrever nossos vetores de onda no novo eixo coordenado.

Determinado  $\mathcal{H}_{|AM\rangle}^{[110]}$ , utilizamos teoria de perturbação de Löwdin a fim de encontrarmos o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]}$ , Hamiltoniano efetivo (proporcional a  $k^3$ ) para a banda de condução, onde agora temos  $\hat{z}$  paralelo a direção [110].

Realizando o procedimento descrito acima, obtemos

$$\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} = \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} K_y \left( 2K_x^2 - K_y^2 + K_z^2 \right) & iK_z \left( -2K_x^2 + 4iK_xK_y - K_y^2 + K_z^2 \right) \\ -iK_z \left( -2K_x^2 - 4iK_xK_y - K_y^2 + K_z^2 \right) & -K_y \left( 2K_x^2 - K_y^2 + K_z^2 \right) \end{pmatrix}$$
(C.2)

com

$$\gamma \equiv \frac{2PB\Delta}{3E_g \left(E_g + \Delta\right)}.$$
(C.3)

No entanto, existe uma outra maneira de obter o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]}$ . Para isso basta rodar o Hamiltoniano de Dresselhaus na direção antiga,  $\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]}$ .

É sabido que o Hamiltoniano de Dresselhaus [001] (escrito na base  $|iS\uparrow\rangle$ , $|iS\downarrow\rangle$ ) é dado por

$$\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]} = \gamma \left( \begin{array}{cc} k_z \left( k_x^2 - k_y^2 \right) & -ik_y \left( k_z^2 - k_x^2 \right) + k_x \left( k_y^2 - k_z^2 \right) \\ ik_y \left( k_z^2 - k_x^2 \right) + k_x \left( k_y^2 - k_z^2 \right) & -k_z \left( k_x^2 - k_y^2 \right) \end{array} \right)$$
(C.4)

Sabendo que o *ket*  $|S\rangle$  é invariante perante rotações, utilizamos (B.15) em (B.9) afim de encontrarmos o Hamiltoniano em outra direção. Escolhendo então  $\theta = \pi/2$  e  $\phi = \pi/4$ , obtemos

$$\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} = R_{\sigma}^{\star}(\phi = \pi/4, \theta = \pi/2) \mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[001]} R_{\sigma}^{T}(\phi = \pi/4, \theta = \pi/2).$$
(C.5)

Fazendo as substituições (B.25) em (C.5), encontramos

$$\mathcal{H}_{Dresselhaus}^{[110]} = \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} K_y \left( 2K_x^2 - K_y^2 + K_z^2 \right) & iK_z \left( -2K_x^2 + 4iK_xK_y - K_y^2 + K_z^2 \right) \\ -iK_z \left( -2K_x^2 - 4iK_xK_y - K_y^2 + K_z^2 \right) & -K_y \left( 2K_x^2 - K_y^2 + K_z^2 \right) \end{pmatrix}$$
(C.6)

Resultado esse em acordo com o Hamiltoniano de Dresselhaus [110] determinado a partir do Hamiltoniano em bulk  $\mathcal{H}^{[110]}_{|AM\rangle}$ .

.

## **APÊNDICE D**

# OBTENÇÃO DO HAMILTONIANO DE RASHBA EM QUALQUER DIREÇÃO

O capítulo 4 junto as referências,<sup>35,51</sup> nos mostrou que o Hamiltoniano de Rashba é originário do Hamiltoniano de Kane,<sup>39</sup> derivado no apêndice A e E e dado por

 $\begin{pmatrix} E_s & 0 & -\frac{k_+P}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{2}{3}}k_zP & \frac{k_-P}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{k_zP}{\sqrt{3}} & -\frac{k_-P}{\sqrt{3}} \\ 0 & E_s & 0 & -\frac{k_+P}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}}k_zP & \frac{k_-P}{\sqrt{2}} & -\frac{k_+P}{\sqrt{3}} & \frac{k_zP}{\sqrt{3}} \\ -\frac{k_-P}{\sqrt{2}} & 0 & E_s - E_g & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}k_zP & -\frac{k_-P}{\sqrt{6}} & 0 & E_s - E_g & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}k_zP & 0 & 0 & E_s - E_g & 0 & 0 & 0 \\ \frac{k_+P}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}}k_zP & 0 & 0 & E_s - E_g & 0 & 0 \\ 0 & \frac{k_+P}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & E_s - E_g & 0 & 0 \\ 0 & \frac{k_+P}{\sqrt{3}} & -\frac{k_-P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & E_s - E_g - \Delta & 0 \\ -\frac{k_zP}{\sqrt{3}} & -\frac{k_-P}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & E_s - E_g - \Delta & 0 \\ -\frac{k_+P}{\sqrt{3}} & \frac{k_zP}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & E_s - E_g - \Delta & 0 \\ \end{pmatrix}$ 

O interessante aqui é que independente da escolha de heta e  $\phi$  sempre teremos a equação

$$\mathcal{H}_{Kane}^{[abc]} = \widetilde{U}^{\dagger}(\phi, \theta) \mathcal{H}_{Kane}^{[001]} \widetilde{U}(\phi, \theta) = \mathcal{H}_{Kane}^{[001]} \quad , \tag{D.2}$$

como sendo verdadeira.

Dessa maneira, vemos que o Hamiltoniano de Kane se mantém o mesmo, independente da direção a qual o eixo  $\hat{z}$  foi fixado. No entanto, esse fato não significa que o Hamiltoniano de Rashba será o mesmo. Isso se deve pois além do Hamiltoniano de Rashba (na direção [abc]) depender de  $\mathcal{H}_{Kane}^{[abc]}$ , este também depende dos offsets das bandas junto a massa efetiva do elétron nesta direção. Como não existem motivos físicos para afirmar que ambos offsets e as massas são as mesmas em diferentes direções, não podemos dizer que o Hamiltoniano de Rashba na direção [abc] é o mesmo que o na direção [001]. No entanto, ainda podemos dizer que a forma de ambos é a mesma.

## APÊNDICE E

# CÁLCULO DOS ELEMENTOS DE MATRIZ UTILIZANDO TEORIA DE GRUPOS

As representações matriciais dos nossos elementos necessárias em nossos cálculos vem mostradas abaixo

Elemento S<sub>4</sub>

$$S_{4x}(\Gamma_5) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_{4y}(\Gamma_5) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad e \quad S_{4z}(\Gamma_5) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ (E.1) \end{pmatrix}$$

$$S_{4x}(\Gamma_4) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_{4y}(\Gamma_4) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad e \quad S_{4z}(\Gamma_4) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
(E.2)

Elemento C<sub>3(111)</sub>

$$C_{3(111)}(\Gamma_5) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad e \quad C_{3(111)}(\Gamma_4) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$
(E.3)

Elemento  $\sigma_{(101)}$ 

$$\sigma_{(101)}(\Gamma_5) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad e \quad \sigma_{(101)}(\Gamma_4) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
(E.4)

Elemento C<sub>2</sub>

$$C_{2(100)}(\Gamma_5) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, C_{2(010)}(\Gamma_5) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} e C_{2(001)}(\Gamma_5) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ (E.5) \end{pmatrix}.$$

$$C_{2(100)}(\Gamma_4) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, C_{2(010)}(\Gamma_4) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} e C_{2(001)}(\Gamma_4) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ (E.6) \end{pmatrix}.$$

Sabido as matrizes acima, para proceder com o cálculo dos elementos devemos analisar agora como cada termo do Hamiltoniano A.23 se "transforma". Em outras palavras, vamos classificar as simetrias de cada termo do Hamiltoniano comparando-os com as funções de base do grupo pontual  $T_d$ , que se encontram na tabela de caracter, Tab. (A.1).

### E.0.1 Acoplamento doas bandas devido à $\mathcal{H}_0$

Começaremos agora com o cálculo dos elementos de matriz, começando pela projeção de  $\mathcal{H}_0$ . Devido a base (ortogonal e degenerada) que estamos projetando ser as autofunções

de  $\mathcal{H}_0$  podemos falar sem nenhum problema que

$$\langle s | \mathcal{H}_0 | s \rangle = E_s, \qquad \langle s | \mathcal{H}_0 | x_i \rangle = 0 \quad e \quad \langle x_i | \mathcal{H}_0 | x_i \rangle = E_P$$
 (E.7)

No entanto, como nosso foco é teoria de grupos, iremos mostrar tais relações usando-a.

Começaremos a determinar os elementos de matriz para o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$ , representada matricialmente na base  $|S\rangle$ ,  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$ ,  $|Z\rangle$  por

$$\mathcal{H}_{0} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{0,(1\times1)}^{(\Gamma_{1}\to\Gamma_{1})} & \mathcal{H}_{0,(1\times3)}^{(\Gamma_{1}\to\Gamma_{5}^{\nu})} \\ \mathcal{H}_{0,(1\times3)}^{\dagger(\Gamma_{1}\to\Gamma_{5}^{\nu})} & \mathcal{H}_{0,(3\times3)}^{(\Gamma_{5}^{\nu}\to\Gamma_{5}^{\nu})} \end{pmatrix}$$
(E.8)

#### **E.0.1.1** Acoplamento de $\Gamma_1^c$ com $\Gamma_1^c$ por $\mathcal{H}_0$ , $\langle s | \mathcal{H}_0 | s \rangle$

Sabemos que,  $\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$ , onde  $V(\vec{r})$  é periódico perante a rede de Bravais e consequentemente invariante por qualquer elemento do grupo  $T_d$ . Sendo assim,  $\mathcal{H}_0$  se transforma como a identidade (invariante perante qualquer elemento do grupo) ou seja, se transforma como a função de base da representação irredutível  $\Gamma_1$ . Sendo assim precisamos analisar o produto direto entre as 3 representações irredutíveis. Consultando a Tab. (A.1), escrevemos

$$\Gamma_1 \otimes \Gamma_1 \otimes \Gamma_1 = \Gamma_1 \otimes \Gamma_1 = \Gamma_1, \tag{E.9}$$

e utilizando então o teorema enunciado por nós no capítulo 1, chegamos a conclusão de que, o elemento de matriz  $\langle S | \mathcal{H}_0 | S \rangle$  não é zero, uma vez que o produto direto resulta em um termo igual a identidade. Com isso, tomamos

$$\langle S | \mathcal{H}_0 | S \rangle = E_s \tag{E.10}$$

E portanto, nossa matriz de acoplamento,  $\mathcal{H}_0$ , de  $\Gamma_1^c$  com  $\Gamma_1^c$ , será

$$H_{0,(1\times1)}^{\Gamma_1\to\Gamma_1} = \left( E_s \right) \tag{E.11}$$

#### E.0.1.2 Acoplamento de $\Gamma_1^c$ com $\Gamma_5^v$ por $\mathcal{H}_0$ , $\langle S | \mathcal{H}_0 | X_i \rangle$

Utilizando o resultado anterior de que  $\mathcal{H}_0$  se transforma como a identidade, basta analisarmos agora o produto direto  $\Gamma_1 \otimes \Gamma_1 \otimes \Gamma_5$ . Consultando a Tab. (A.1), escrevemos

$$\Gamma_1 \otimes \Gamma_1 \otimes \Gamma_5 = \Gamma_1 \otimes \Gamma_5 = \Gamma_5, \tag{E.12}$$

ou seja, como o produto não contem a identidade esse elemento de matriz, este será nulo,

$$\langle S | \mathcal{H}_0 | X_i \rangle = 0. \tag{E.13}$$

E portanto, nossa matriz de acoplamento,  $\mathcal{H}_0$ , de  $\Gamma_1^c$  com  $\Gamma_5^v$ , será

$$\mathcal{H}_{0,(1\times3)}^{\Gamma_1 \to \Gamma_5^{\nu}} = \left(\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \end{array}\right) \tag{E.14}$$

#### E.0.1.3 Acoplamento de $\Gamma_5^{\nu}$ com $\Gamma_5^{\nu}$ por $\mathcal{H}_0$ , $\langle x_i | \mathcal{H}_0 | x_j \rangle$

Agora, o produto que devemos analisar é  $\Gamma_5 \otimes \Gamma_1 \otimes \Gamma_5$ . Consultando a tabela, chegamos em

$$\Gamma_5 \otimes \Gamma_1 \otimes \Gamma_5 = \Gamma_1 \otimes \Gamma_5 = \Gamma_1 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5, \tag{E.15}$$

e portanto, notamos que como o produto direto contem a identidade, haverá um único termo, independente e diferente de zero. Vamos analisar agora, para quais valores de *i* e *j*, isso acontece.

Conhecido o elemento  $S_4$  e como ele opera, vamos aplicá-lo aos elementos de matrix, inserindo a identidade,  $S_{4x}^{-1}S_{4x} = 1$ , nos elementos. Primeiramente, analisaremos o caso onde  $i \neq j$ , começando com o elemento  $\langle x | H_0 | y \rangle$ .

$$\langle x | \mathcal{H}_0 | z \rangle = \langle x | S_{4x}^{-1} S_{4x} \mathcal{H}_0 S_{4x}^{-1} S_{4x} | z \rangle = \langle x | S_{4x}^{-1} \mathcal{H}_0 S_{4x} | z \rangle = - \langle x | \mathcal{H}_0 | y \rangle$$
(E.16)

onde usamos o fato de que  $\mathcal{H}_0$  é invariante sobre transformações e as equações (E.1).

Vamos agora, inserir mais uma vez a identidade,  $S_{4x}^{-1}S_{4x} = 1$ , em (E.16)

$$\langle x | \mathcal{H}_0 | z \rangle = \langle x | S_{4x}^{-1} S_{4x} \mathcal{H}_0 S_{4x}^{-1} S_{4x} | z \rangle = \langle x | S_{4x}^{-1} \mathcal{H}_0 S_{4x} | z \rangle = - \langle x | \mathcal{H}_0 | y \rangle$$
(E.17)

ou seja, chegamos a conclusão de que

$$\langle x | \mathcal{H}_0 | y \rangle \stackrel{S_{4x}}{=} \langle x | \mathcal{H}_0 | z \rangle \stackrel{S_{4x}}{=} - \langle x | \mathcal{H}_0 | y \rangle$$
(E.18)

e portanto

$$\langle x | \mathcal{H}_0 | y \rangle = \langle x | \mathcal{H}_0 | z \rangle = 0 \tag{E.19}$$

Vamos agora, inserir a identidade em outro elemento de matriz

$$\langle y | \mathcal{H}_{0} | z \rangle = \langle y | S_{4y}^{-1} S_{4y} \mathcal{H}_{0} S_{4y}^{-1} S_{4y} | z \rangle = \langle y | S_{4y}^{-1} \mathcal{H}_{0} S_{4y} | z \rangle = \langle -y | \mathcal{H}_{0} | -x \rangle = \langle y | \mathcal{H}_{0} | x \rangle = 0$$
(E.20)

onde usamos as equações (E.1) e o fato de que  $\mathcal{H}_0$  é um escalar. Compactando, temos

$$\langle x | \mathcal{H}_0 | y \rangle = \langle x | \mathcal{H}_0 | z \rangle = \langle y | \mathcal{H}_0 | z \rangle = 0$$
(E.21)

Vale lembrar que os outros termos do tipo  $\langle x_i | \mathcal{H}_0 | x_j \rangle$ , com  $i \neq j$ , são determinados pela Hermiticidade de  $\mathcal{H}_0$ . Terminada a análise para o caso  $i \neq j$ , vamos calcular agora, os elementos com i = j, começando com o elemento  $\langle x | \mathcal{H}_0 | x \rangle$ . Aplicando  $S_{4y}$  e utilizando (E.1), temos

$$\langle x | \mathcal{H}_0 | x \rangle = \langle x | S_{4y}^{-1} S_{4y} \mathcal{H}_0 S_{4y}^{-1} S_{4y} | x \rangle = \langle x | S_{4y}^{-1} \mathcal{H}_0 S_{4y} | x \rangle = \langle z | \mathcal{H}_0 | z \rangle$$
(E.22)

aplicando agora  $S_{4z}$ , e usando (E.1), encontramos

$$\langle z | \mathcal{H}_0 | z \rangle = \langle z | S_{4z}^{-1} S_{4z} \mathcal{H}_0 S_{4z}^{-1} S_{4z} | z \rangle = \langle z | S_{4z}^{-1} \mathcal{H}_0 S_{4z} | z \rangle = \langle y | \mathcal{H}_0 | y \rangle$$
(E.23)

Portanto,

$$\langle x | \mathcal{H}_0 | x \rangle \stackrel{S_{4y}}{=} \langle z | \mathcal{H}_0 | z \rangle \stackrel{S_{4z}}{=} \langle y | \mathcal{H}_0 | y \rangle \equiv E_p$$
(E.24)

E portanto, nossa matriz de acoplamento,  $\mathcal{H}_0$ , de  $\Gamma_5^c$  com  $\Gamma_5^c$ , será

$$\mathcal{H}_{0,(3\times3)}^{\Gamma_{5}^{c}\to\Gamma_{5}^{c}} = \begin{pmatrix} E_{p} & 0 & 0\\ 0 & E_{p} & 0\\ 0 & 0 & E_{p} \end{pmatrix}$$
(E.25)

Com isso, conseguimos finalmente escrever  $\mathcal{H}_0$  na nossa base

$$\mathcal{H}_{0} = \begin{pmatrix} E_{s} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{\rho} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{\rho} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{\rho} \end{pmatrix}$$
(E.26)

#### E.0.2 Acoplamento das bandas devido à $\mathcal{H}_{k,p}$

Começaremos a determinar os elementos de matriz para o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{k,p} = \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}$ , representada matricialmente na base  $|s\rangle$ ,  $|x\rangle$ ,  $|y\rangle$ ,  $|z\rangle$  por

$$\mathcal{H}_{k,p} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{k,p,(1\times1)}^{(\Gamma_1 \to \Gamma_1)} & \mathcal{H}_{k,p,(1\times3)}^{(\Gamma_1 \to \Gamma_5')} \\ \mathcal{H}_{k,p,(1\times3)}^{\dagger(\Gamma_1 \to \Gamma_5')} & \mathcal{H}_{k,p,(3\times3)}^{(\Gamma_5' \to \Gamma_5')} \end{pmatrix}$$
(E.27)

E.0.2.1 Acoplamento de  $\Gamma_1^c$  com  $\Gamma_1^c$  por  $\mathcal{H}_{k,p}$ ,  $\langle s | \mathcal{H}_{k,p} | s \rangle$ 

Sabendo que o vetor,  $\vec{k}$ , pode ser tirado para fora do produto interno e que o vetor,  $\vec{p}$ , se transforma da mesma forma que as funções de base da representação irredutível,  $\Gamma_5$ , precisamos analisar assim o produto  $\Gamma_1 \otimes \Gamma_5 \otimes \Gamma_1$ , o qual consultando a tabela, nos dá

$$\Gamma_1 \otimes \Gamma_5 \otimes \Gamma_1 = \Gamma_1 \otimes \Gamma_5 = \Gamma_5 \tag{E.28}$$

ou seja, o elemento de matriz  $\langle s | \mathcal{H}_{k,p} | s \rangle$  deve ser zero, uma vez que a representação irredutível identidade,  $\Gamma_1$  não aparece.
$$\langle s | p_i | s \rangle = 0 \tag{E.29}$$

E portanto, nossa matriz acoplamento de  $\Gamma_1^c$  com  $\Gamma_1^c$ , será

$$\mathcal{H}_{k,\rho,(1\times1)}^{\Gamma_1\to\Gamma_1} = \left(\begin{array}{c}0\end{array}\right) \tag{E.30}$$

E.0.2.2 Acoplamento de  $\Gamma_1^c$  com  $\Gamma_5^v$  por  $\mathcal{H}_{k.p}$ ,  $\langle s | \mathcal{H}_{k.p} | x_i \rangle$ :

Utilizando a discussão anterior de que o vetor  $\vec{p}$  se transforma de acordo com a representação  $\Gamma_5$ , devemos analisar o produto  $\Gamma_1 \otimes \Gamma_5 \otimes \Gamma_5$ . Consultando a tabela, escrevemos

$$\Gamma_1 \otimes \Gamma_5 \otimes \Gamma_5 = \Gamma_5 \otimes \Gamma_5 = \Gamma_1 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5 \tag{E.31}$$

ou seja, o produto contem a identidade e portanto, haverá um único termo independente, da forma  $\langle s | p_i | x_j \rangle$ , diferente de zero.

Vamos começar aplicando a identidade  $S_{4y}^{-1}S_{4y} = 1$  no elemento de matriz  $\langle s | p_x | x \rangle$ , correspondendo ao caso i = j. Como já dissemos,  $\vec{p}$  se transforma de acordo com  $\Gamma_5$  e sendo assim, sua matriz de transformação é dada pelas matrizes (E.1) de onde tiramos claramente que  $S_{4y}p_xS_{4y}^{-1} = p_z$  e  $S_{4x}p_zS_{4x}^{-1} = p_y$ . Aplicando primeiramente  $S_{4y}$  e usando (E.1), temos

$$\langle s | p_x | x \rangle = \langle s | S_{4y}^{-1} S_{4y} p_x S_{4y}^{-1} S_{4y} | x \rangle = \langle s | S_{4y} p_x S_{4y}^{-1} | z \rangle = \langle s | p_z | z \rangle$$
(E.32)

Aplicando agora  $S_{4x}$ , temos

$$\langle s | p_z | z \rangle = \langle s | S_{4x}^{-1} S_{4x} p_z S_{4x}^{-1} S_{4x} | z \rangle = \langle s | S_{4x} p_x S_{4x}^{-1} | y \rangle = \langle s | p_y | y \rangle$$
(E.33)

e portanto

$$\langle s | p_x | x \rangle \stackrel{S_{4y}}{=} \langle s | p_y | y \rangle \stackrel{S_{4x}}{=} \langle s | p_z | z \rangle \equiv \frac{im_0 P}{\hbar}$$
(E.34)

Vamos agora, analisar o valor do elemento para  $i \neq j$ , primeiro no caso i = 1

$$\langle s | p_x | y \rangle = \langle s | S_{4x}^{-1} S_{4x} p_x S_{4x}^{-1} S_{4x} | y \rangle = \langle s | S_{4x} p_x S_{4x}^{-1} | -z \rangle = \langle s | -p_x | -z \rangle = \langle s | p_x | z \rangle$$
(E.35)

onde utilizamos  $S_{4x}p_xS_{4x}^{-1}=-p_x$ . Aplicando mais uma vez o operador identidade,

$$\langle s | p_x | z \rangle = \langle s | S_{4x}^{-1} S_{4x} p_x S_{4x}^{-1} S_{4x} | z \rangle = \langle s | S_{4x} p_x S_{4x}^{-1} | y \rangle = - \langle s | p_x | y \rangle$$
(E.36)

Concluimos então que

$$\langle s | p_x | y \rangle \stackrel{S_{4x}}{=} \langle s | p_x | z \rangle \stackrel{S_{4x}}{=} - \langle s | p_x | y \rangle$$
(E.37)

e portanto

$$\langle s | p_x | y \rangle = \langle s | p_x | z \rangle = 0$$
 (E.38)

Vamos agora, fazer o mesmo proceder, só que agora com i = 2,

$$\langle s | p_{y} | z \rangle = \langle s | S_{4y}^{-1} S_{4y} p_{y} S_{4y}^{-1} S_{4y} | z \rangle = \langle s | S_{4y} p_{y} S_{4y}^{-1} | -x \rangle = \langle s | -p_{y} | -x \rangle = \langle s | p_{y} | x \rangle$$
(E.39)

onde utilizamos  $S_{4y}p_yS_{4y}^{-1}=-p_y.$ 

Aplicando novamente o operador identidade,  $S_{4y}S_{4y}^{-1} = 1$ , obtemos

$$\langle s | p_y | x \rangle = \langle s | S_{4y}^{-1} S_{4y} p_y S_{4y}^{-1} S_{4y} | x \rangle = \langle s | S_{4y} p_y S_{4y}^{-1} | z \rangle = \langle s | - p_y | z \rangle = - \langle s | p_y | z \rangle$$
(E.40)

Ou seja, concluimos que

$$\langle s | p_y | z \rangle \stackrel{S_{4y}}{=} \langle s | p_y | x \rangle \stackrel{S_{4y}}{=} - \langle s | p_y | z \rangle$$
(E.41)

e portanto

$$\langle s | \rho_y | z \rangle = \langle s | \rho_y | x \rangle = 0$$
 (E.42)

Basta finalmente, calcularmos para i = 3

$$\langle s | p_z | x \rangle = \langle s | S_{4z}^{-1} S_{4z} p_z S_{4z}^{-1} S_{4z} | x \rangle = \langle s | S_{4z} p_z S_{4z}^{-1} | -y \rangle = \langle s | -p_z | -y \rangle = \langle s | p_z | y \rangle$$
(E.43)

onde utilizamos  $S_{4z}p_zS_{4z}^{-1} = -p_z$ . Aplicando mais uma vez o operador identidade,

$$\langle s | p_z | y \rangle = \langle s | S_{4z}^{-1} S_{4z} p_z S_{4z}^{-1} S_{4z} | y \rangle = \langle s | S_{4z} p_z S_{4z}^{-1} | x \rangle = - \langle s | p_z | x \rangle$$
(E.44)

Ou seja,

$$\langle s | p_z | x \rangle \stackrel{S_{4z}}{=} \langle s | p_z | y \rangle \stackrel{S_{4z}}{=} - \langle s | p_z | x \rangle$$
(E.45)

e portanto

$$\langle s | \, \rho_z \, | x \rangle = \langle s | \, \rho_z \, | y \rangle = 0 \tag{E.46}$$

E portanto, nossa matriz acoplamento de  $\Gamma_1^c$  com  $\Gamma_5^v$ , será

$$\mathcal{H}_{k,p,(1\times3)}^{\Gamma_1 \to \Gamma_5^{\vee}} = \left( \begin{array}{cc} ik_x P & ik_y P & ik_z P \end{array} \right)$$
(E.47)

E.0.2.3 Acoplamento de  $\Gamma_{5}^{v}$  com  $\Gamma_{5}^{v}$  por  $\mathcal{H}_{k.p}$ ,  $\langle x_{i} | \mathcal{H}_{k.p} | x_{j} \rangle$ 

Agora, o produto que devemos analisar é o  $\Gamma_5 \otimes \Gamma_5 \otimes \Gamma_5$ . Consultando a tabela, chegamos em

$$\Gamma_5 \otimes \Gamma_5 \otimes \Gamma_5 = (\Gamma_1 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5) \otimes \Gamma_5 = \Gamma_1 \oplus \Gamma_2 \oplus 2\Gamma_3 \oplus 3\Gamma_4 \oplus 4\Gamma_5$$
(E.48)

e portanto, notamos que o produto direto contem a identidade. Sendo assim, haverá um único termo independente, diferente de zero. Vamos analisar agora, para quais valores de *i* e *j*, isso acontece.

Conhecido o elemento  $C_{3(111)}$  e como ele opera, vamos aplicá-lo aos elementos de matriz, começando com i = 1 e j = 3. Inserindo a identidade,  $C_{3(111)}^{-1}C_{3(111)} = 1$ , neste, temos

$$\langle x | p_y | z \rangle = \langle x | C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} p_y C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} | z \rangle = \langle z | C_{3(111)} p_y C_{3(111)}^{-1} | y \rangle = \langle z | p_x | y \rangle \quad (E.49)$$

Aplicando a identidade no resultado final,

$$\langle z | p_x | y \rangle = \langle z | C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} p_x C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} | y \rangle = \langle y | C_{3(111)} p_x C_{3(111)}^{-1} | x \rangle = \langle y | p_z | x \rangle \quad (E.50)$$

Com isso, conseguimos a seguinte relação

$$\langle x | p_y | z \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle z | p_x | y \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle y | p_z | x \rangle$$
(E.51)

Iremos agora, aplicar a mesma identidade,  $C_{3(111)}^{-1}C_{3(111)} = 1$ , só que começaremos agora com o elemento de matriz, i = 2 e j = 3, correspondente à

$$\langle y | p_x | z \rangle = \langle y | C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} p_x C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} | z \rangle = \langle x | C_{3(111)} p_x C_{3(111)}^{-1} | y \rangle = \langle x | p_z | y \rangle \quad (E.52)$$

Aplicando a identidade no resultado final,

$$\langle x | p_z | y \rangle = \langle x | C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} p_z C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} | y \rangle = \langle z | C_{3(111)} p_z C_{3(111)}^{-1} | x \rangle = \langle z | p_y | x \rangle \quad (E.53)$$

Com isso, conseguimos a seguinte relação

$$\langle y | p_x | z \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle x | p_z | y \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle z | p_y | x \rangle$$
(E.54)

O que faremos agora, é aplicar o elemento  $\sigma_{(101)}$  em  $\langle y | p_z | x \rangle$ , afim de tentar conectar os elementos (E.51) com os de (E.54), uma vez que só existe um elemento independente não nulo. Inserindo a identidade,  $\sigma_{(101)}^{-1}\sigma_{(101)} = 1$ , e, utilizando as equações (E.4), temos

$$\langle y | p_z | x \rangle = \langle y | \sigma_{(101)}^{-1} \sigma_{(101)} p_z \sigma_{(101)}^{-1} \sigma_{(101)} | x \rangle = \langle y | \sigma_{(101)} p_z \sigma_{(101)}^{-1} | z \rangle = \langle y | p_x | z \rangle$$
(E.55)

e consequentemente, conseguimos conectar (E.51) com (E.54), nos dando

$$\langle x | p_{y} | z \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle z | p_{x} | y \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle y | p_{z} | x \rangle \stackrel{\sigma_{(101)}}{=} \langle y | p_{x} | z \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle x | p_{z} | y \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle z | p_{y} | x \rangle \equiv i \frac{m_{0}R}{\hbar}$$
(E.56)

Calculado todos os elementos de matriz com índices sem repetições, ainda falta realizar o cálculo para índices iguais. Começando por dois índices iguais,  $\langle x | p_y | y \rangle$ , onde inserimos a identidade  $S_{4y}^{-1}S_{4y} = 1$ 

$$\langle x | p_{y} | y \rangle = \langle x | S_{4y}^{-1} S_{4y} p_{y} S_{4y}^{-1} S_{4y} | y \rangle = \langle z | S_{4y} p_{y} S_{4y}^{-1} | -y \rangle = \langle z | -p_{y} | -y \rangle = \langle z | p_{y} | y \rangle$$
(E.57)

Aplicando a identidade no resultado final acima, (E.57), temos

$$\langle z | p_{y} | y \rangle = \langle z | S_{4y}^{-1} S_{4y} p_{y} S_{4y}^{-1} S_{4y} | y \rangle = \langle -x | S_{4y} p_{y} S_{4y}^{-1} | -y \rangle = \langle -z | -p_{y} | -y \rangle = - \langle z | p_{y} | y \rangle$$
(E.58)

concluindo que

$$\langle x | p_y | y \rangle \stackrel{S_{4y}}{=} \langle z | p_y | y \rangle \stackrel{S_{4y}}{=} - \langle x | p_y | y \rangle$$
(E.59)

e consequentemente

$$\langle x | p_y | y \rangle = \langle z | p_y | y \rangle = 0 \tag{E.60}$$

Vamos agora analisar,  $\langle x | p_z | z \rangle$ , onde inserimos a identidade  $S_{4z}^{-1}S_{4z} = 1$ 

$$\langle x | p_z | z \rangle = \langle x | S_{4z}^{-1} S_{4z} p_z S_{4z}^{-1} S_{4z} | z \rangle = \langle -y | S_{4z} p_z S_{4z}^{-1} | -z \rangle = \langle -y | -p_z | -z \rangle = - \langle y | p_z | z \rangle$$
(E.61)

Aplicando a identidade no resultado final acima, (E.61), temos

$$-\langle y | p_{z} | z \rangle = -\langle y | S_{4z}^{-1} S_{4z} p_{z} S_{4z}^{-1} S_{4z} | z \rangle = -\langle x | S_{4z} p_{z} S_{4z}^{-1} | -z \rangle = \langle x | -p_{z} | z \rangle = -\langle x | p_{z} | z \rangle$$
(E.62)

concluindo que

$$\langle x | p_z | z \rangle \stackrel{S_{4z}}{=} - \langle y | p_z | z \rangle \stackrel{S_{4z}}{=} - \langle x | p_z | z \rangle$$
(E.63)

e consequentemente

$$\langle x | p_z | z \rangle = \langle y | p_z | z \rangle = 0 \tag{E.64}$$

Vamos agora analisar,  $\langle y | p_x | x \rangle$ , onde inserimos a identidade  $S_{4x}^{-1}S_{4x} = 1$ 

$$\langle y | p_x | x \rangle = \langle y | S_{4x}^{-1} S_{4x} p_x S_{4x}^{-1} S_{4x} | x \rangle = \langle -z | S_{4x} p_x S_{4x}^{-1} | -x \rangle = \langle z | -p_x | x \rangle = - \langle z | p_x | x \rangle$$
(E.65)

Aplicando a identidade no resultado final acima, (E.65), temos

$$-\langle z | p_{x} | x \rangle = -\langle z | S_{4x}^{-1} S_{4x} p_{x} S_{4x}^{-1} S_{4x} | x \rangle = -\langle y | S_{4x} p_{x} S_{4x}^{-1} | -x \rangle = \langle y | -p_{x} | x \rangle = -\langle y | p_{x} | x \rangle$$
(E.66)

concluindo que

$$\langle y | p_x | x \rangle \stackrel{S_{4x}}{=} - \langle z | p_x | x \rangle \stackrel{S_{4x}}{=} - \langle y | p_x | x \rangle$$
(E.67)

e consequentemente

$$\langle y | p_x | x \rangle = \langle z | p_x | x \rangle = 0$$
 (E.68)

Sendo assim, só nos resta agora, calcularmos os elementos de matriz do tipo  $\langle x_i | p_j | x_i \rangle$ , onde vamos inserir a identidade  $C_{2k}^{-1}C_{2k} = 1$  com a restrição,  $j \neq k$ , utilizando as equações (E.5), temos

$$\langle x_i | p_j | x_i \rangle = \langle x_i | C_{2k}^{-1} C_{2k} p_j C_{2k}^{-1} C_{2k} | x_i \rangle = \langle \pm x_i | C_{2k} p_j C_{2k}^{-1} | \pm x_i \rangle = \langle x_i | C_{2k} p_j C_{2k}^{-1} | x_i \rangle \quad (E.69)$$

onde o sinal positivo é referente a escolha i = k e o sinal negativo a  $i \neq k$ . Vemos no entanto, que para qualquer escolha de k, obtemos o mesmo resultado.

Escolhendo agora,  $k \neq j$ , temos que  $C_{2k}p_jC_{2k}^{-1} = -p_j$ , nos dando

$$\langle x_i | p_j | x_i \rangle = - \langle x_i | p_j | x_i \rangle \tag{E.70}$$

e provamos assim que qualquer elemento do tipo  $\langle x_i | p_j | x_i \rangle$  será nulo para quaisquer valores de *i* e *j*, uma vez que, a única restrição feita foi,  $k \neq j$ , restrição tal que não tira a generalidade de *i* e *j*. Escrevendo então nossa matriz acoplamento, temos

$$\mathcal{H}_{k,p,(3\times3)}^{\Gamma_{5}^{\nu}\to\Gamma_{5}^{\nu}} = \begin{pmatrix} 0 & ik_{z}R & ik_{y}R \\ ik_{z}R & 0 & ik_{x}R \\ ik_{y}R & ik_{x}R & 0 \end{pmatrix}$$
(E.71)

No entanto, vamos mostrar agora que o termo, R, é nulo. Para isso, utilizaremos o operador reversão temporal e suas propriedades.

Sabemos que se o Hamiltoniano for invariante perante o operador Reversão Temporal, os vetores da base, autoestados do Hamiltoniano, dado por  $\{|s\rangle, |x_i\rangle\}$ , serão todos reais.<sup>53</sup> Utilizando esse fato e integrando por partes, temos

$$\langle x_i | p_j | x_k \rangle = \int d^3 r \varphi_i^*(r) p_j \varphi_k(r) = -i\hbar \int dx_1 dx_2 dx_3 \varphi_i^*(r) \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi_k(r)$$

$$= -i\hbar \int dx_1 dx_2 \left\{ \overbrace{[\varphi_i^*(r)\varphi_k(r)]_{-\infty}^{\infty}}^{=0} - \int dx_3 \varphi_k(r) \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi_i^*(r) \right\}$$

$$= -\int d^3 r \varphi_k(r) p_j \varphi_i^*(r)$$

$$= -\int d^3 r \varphi_k^*(r) p_j \varphi_i(r)$$
(E.72)

Obtendo então

$$\langle x_i | \, \rho_j \, | x_k \rangle = - \langle x_k | \, \rho_j \, | x_i \rangle \tag{E.73}$$

No entanto, a equação (E.56) nos diz que

$$\langle x_i | p_j | x_k \rangle = \langle x_k | p_j | x_i \rangle \tag{E.74}$$

Ou seja, o único valor que satisfaz (E.73) e (E.74) é 0, o que corresponde a tomar R como sendo nulo. Concluimos assim que, o anulamento do termo de matriz não é provindo das simetrias do nosso grupo  $T_d$  e sim da simetria do Hamiltoniano perante a Reversão Temporal, como argumenta Dresselhaus em.<sup>53</sup> Sendo assim, nossa matriz acoplamento de  $\Gamma_5^{\nu}$  com  $\Gamma_5^{\nu}$ , será

$$\mathcal{H}_{k.p.(3\times3)}^{\Gamma_{5}^{v}\to\Gamma_{5}^{v}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(E.75)

Com isso, conseguimos finalmente escrever  $\mathcal{H}_{k.p}$  matricialmente

$$\mathcal{H}_{k,p} = \begin{pmatrix} 0 & ik_x P & ik_y P & ik_z P \\ -ik_x P & 0 & 0 & 0 \\ -ik_y P & 0 & 0 & 0 \\ -ik_z P & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(E.76)

## E.0.3 Acoplamento das bandas devido à $\mathcal{H}_{SO}$

Nesta parte, determinaremos os elementos de matriz para o Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{SO} = \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2} \left( \vec{\nabla} V \times \vec{p} \right) \cdot \vec{\sigma} = \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2} \vec{A} \cdot \vec{\sigma}$ , representada matricialmente na base  $|s\rangle$ ,  $|x\rangle$ ,  $|y\rangle$ ,  $|z\rangle$  por

$$\mathcal{H}_{SO} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{SO,(1\times1)}^{[\Gamma_1^c \to \Gamma_1]} & \mathcal{H}_{SO,(1\times3)}^{[\Gamma_1^c \to \Gamma_2^c]} \\ \mathcal{H}_{SO,(1\times3)}^{\dagger([\Gamma_1^c \to \Gamma_2^c])} & \mathcal{H}_{SO,(3\times3)}^{[\Gamma_2^c \to \Gamma_2^c]} \end{pmatrix}$$
(E.77)

## **E.0.3.1** Acoplamento de $\Gamma_1^c$ com $\Gamma_1^c$ por $H_{SO}$ , $\langle s | H_{SO} | s \rangle$

Para analisarmos se existe termo não nulo, devemos olhar para o produto direto de  $\Gamma_1 \otimes \Gamma_4 \otimes \Gamma_1$ , uma vez que,  $H_{SO}$ , se transforma de acordo com  $\Gamma_4$ .

$$\Gamma_1 \otimes \Gamma_4 \otimes \Gamma_1 = \Gamma_1 \otimes \Gamma_4 = \Gamma_4, \tag{E.78}$$

e utilizando então o teorema provado e enunciado por nós, chegamos a conclusão de que o elemento de matriz,  $\langle s | H_{SO} | s \rangle$ , é zero.

$$\langle s | H_{SO} | s \rangle = 0. \tag{E.79}$$

E portanto, nossa matriz acoplamento de  $\Gamma_1^c$  com  $\Gamma_1^c$  será

$$H_{SO,(1\times 1)}^{\Gamma_1 \to \Gamma_1} = (0) . \tag{E.80}$$

## **E.0.3.2** Acoplamento de $\Gamma_1^c$ com $\Gamma_5^v$ por $\mathcal{H}_{SO}$ , $\langle s | \mathcal{H}_{SO} | x_i \rangle$ :

Para esse caso, basta analisarmos o produto direto  $\Gamma_1 \otimes \Gamma_4 \otimes \Gamma_5$ . Consultando a tabela, escrevemos

$$\Gamma_1 \otimes \Gamma_4 \otimes \Gamma_5 = \Gamma_1 \otimes (\Gamma_2 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5) = \Gamma_2 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5$$
(E.81)

ou seja, como o produto não contem a identidade esse elemento de matriz, será nulo,

$$\langle s | \mathcal{H}_{SO} | x_i \rangle = 0 \tag{E.82}$$

E portanto, nossa matriz acoplamento de  $\Gamma_1^c$  com  $\Gamma_5^v$ , será

$$\mathcal{H}_{SO,(1\times3)}^{\Gamma_1^{\varsigma} \to \Gamma_5^{\nu}} = \left(\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \end{array}\right) \tag{E.83}$$

**E.0.3.3** Acoplamento de  $\Gamma_5^{\nu}$  e  $\Gamma_5^{\nu}$  por  $\mathcal{H}_{SO}$ ,  $\langle x_i | \mathcal{H}_{SO} | x_j \rangle$ :

Agora, o produto que devemos analisar é  $\Gamma_5 \otimes \Gamma_4 \otimes \Gamma_5$ . Consultando a tabela, chegamos em

$$\Gamma_5 \otimes \Gamma_4 \otimes \Gamma_5 = \Gamma_5 \otimes (\Gamma_2 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5) = \Gamma_1 \oplus \Gamma_2 \oplus 2\Gamma_3 \oplus 4\Gamma_4 \oplus 3\Gamma_5$$
(E.84)

e portanto, notamos que como o produto direto contem a identidade, haverá um único termo independente, diferente de zero. Vamos analisar agora, para quais valores de *i* e *j*, isso acontece.

Conhecido o elemento,  $C_{3(111)}$ , e como ele opera nas duas representações,  $\Gamma_4$  e  $\Gamma_5$ , correspondente as matrizes (E.3), vamos aplicá-lo aos elementos de matriz, começando

com i = 1 e j = 3. Inserindo a identidade ,  $C_{3(111)}^{-1}C_{3(111)} = 1$ , temos

$$\langle x | A_y | z \rangle = \langle x | C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} A_y C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} | y \rangle = \langle z | C_{3(111)} A_y C_{3(111)}^{-1} | y \rangle = \langle z | A_x | y \rangle \quad (E.85)$$

Aplicando novamente a identidade no resultado final acima,

$$\langle z | A_x | y \rangle = \langle z | C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} A_x C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} | y \rangle = \langle y | C_{3(111)} A_x C_{3(111)}^{-1} | x \rangle = \langle y | A_z | x \rangle \quad (E.86)$$

Com isso, conseguimos a seguinte relação

$$\langle x | A_y | z \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle z | A_x | y \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle y | A_z | x \rangle$$
(E.87)

Iremos agora, aplicar a mesma identidade,  $C_{3(111)}^{-1}C_{3(111)} = 1$ , só que começaremos agora com o elemento de matriz correspondente à i = 2 e j = 3.

$$\langle y | A_x | z \rangle = \langle y | C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} A_x C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} | z \rangle = \langle x | C_{3(111)} A_x C_{3(111)}^{-1} | y \rangle = \langle x | A_z | y \rangle$$
(E.88)

Aplicando novamente a identidade no resultado final acima,

$$\langle x | A_z | y \rangle = \langle x | C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} A_z C_{3(111)}^{-1} C_{3(111)} | y \rangle = \langle z | C_{3(111)} A_z C_{3(111)}^{-1} | x \rangle = \langle z | A_y | x \rangle$$
(E.89)

Com isso, conseguimos a seguinte relação

$$\langle y | A_x | z \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle x | A_z | y \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle z | A_y | x \rangle$$
(E.90)

O que faremos agora, é aplicar o elemento  $\sigma_{(101)}$  em  $\langle x | A_z | y \rangle$  afim de tentar conectar os elementos (E.87) com os de (E.90), uma vez que só existe um elemento independente não nulo. Inserindo a identidade,  $\sigma_{(101)}^{-1}\sigma_{(101)} = \mathbf{1}$ , e, utilizando as equações (E.4), temos

$$\langle x | A_z | y \rangle = \langle x | \sigma_{(101)}^{-1} \sigma_{(101)} A_z \sigma_{(101)}^{-1} \sigma_{(101)} | y \rangle = \langle z | \sigma_{(101)} A_z \sigma_{(101)}^{-1} | y \rangle = - \langle z | A_x | y \rangle$$
(E.91)

e consequentemente, conseguimos conectar (E.87) com (E.90), nos dando

$$\langle x | A_{y} | z \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle z | A_{x} | y \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} \langle y | A_{z} | x \rangle \stackrel{\sigma_{(101)}}{=} - \langle y | A_{x} | z \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} - \langle x | A_{z} | y \rangle \stackrel{C_{3(111)}}{=} - \langle z | A_{y} | x \rangle \equiv i \frac{\Delta}{3} \frac{4m_{0}^{2}c^{2}}{\hbar}$$
(E.92)

Calculado todos os elementos de matriz com índices sem repetições, vamos realizar o cálculo para índices iguais. Começando com o elemento  $\langle x | A_x | y \rangle$ .

Inserindo a identidade,  $S_{4x}^{-1}S_{4x} = 1$ , e sabendo por (E.2) que  $S_{4x}A_xS_{4x}^{-1} = A_x$ 

$$\langle x | A_x | y \rangle = \langle x | S_{4x}^{-1} S_{4x} A_x S_{4x}^{-1} S_{4x} | y \rangle = \langle -x | S_{4x} A_x S_{4x}^{-1} | -z \rangle = \langle x | A_x | z \rangle$$
(E.93)

Aplicando novamente a identidade,  $S_{4x}^{-1}S_{4x} = 1$ , no ultimo termo da equação acima, temos

$$\langle x | A_x | z \rangle = \langle x | S_{4x}^{-1} S_{4x} A_x S_{4x}^{-1} S_{4x} | z \rangle = \langle -x | S_{4x} A_x S_{4x}^{-1} | y \rangle = - \langle x | A_x | y \rangle$$
(E.94)

Concluimos então que

$$\langle x | A_x | y \rangle \stackrel{S_{4x}}{=} \langle x | A_x | z \rangle \stackrel{S_{4x}}{=} - \langle x | A_x | y \rangle$$
(E.95)

e portanto

$$\langle x | A_x | y \rangle = \langle x | A_x | z \rangle = 0$$
 (E.96)

Partimos para o cálculo do próximo termo,  $\langle y | A_y | z \rangle$ . Inserindo a identidade,  $S_{4y}^{-1}S_{4y} = 1$ , e sabendo por (E.2) que  $S_{4y}A_yS_{4y}^{-1} = A_y$ 

$$\langle y | A_y | z \rangle = \langle y | S_{4y}^{-1} S_{4y} A_y S_{4y}^{-1} S_{4y} | z \rangle = \langle -y | S_{4y} A_y S_{4y}^{-1} | -x \rangle = \langle y | A_y | x \rangle$$
(E.97)

Aplicando novamente a identidade,  $S_{4y}^{-1}S_{4y} = 1$ , no ultimo termo da equação acima, temos

$$\langle y | A_y | x \rangle = \langle y | S_{4y}^{-1} S_{4y} A_y S_{4y}^{-1} S_{4y} | x \rangle = \langle -y | S_{4y} A_y S_{4y}^{-1} | z \rangle = - \langle y | A_y | z \rangle$$
(E.98)

Concluimos então que

$$\langle y | A_y | z \rangle \stackrel{S_{4y}}{=} \langle y | A_y | x \rangle \stackrel{S_{4y}}{=} - \langle y | A_y | z \rangle$$
(E.99)

e portanto

$$\langle y | A_y | z \rangle = \langle y | A_y | x \rangle = 0$$
 (E.100)

Partimos para o cálculo do próximo termo,  $\langle z | A_z | x \rangle$ . Inserindo a identidade,  $S_{4z}^{-1}S_{4z} =$ 1, e sabendo por (E.2) que  $S_{4z}A_zS_{4z}^{-1} = A_z$ 

$$\langle z | A_z | x \rangle = \langle z | S_{4z}^{-1} S_{4z} A_z S_{4z}^{-1} S_{4z} | x \rangle = \langle -z | S_{4z} A_z S_{4z}^{-1} | -y \rangle = \langle z | A_z | y \rangle$$
(E.101)

Aplicando novamente a identidade,  $S_{4z}^{-1}S_{4z} = 1$ , no ultimo termo da equação acima, temos

$$\langle z | A_z | y \rangle = \langle z | S_{4z}^{-1} S_{4z} A_z S_{4z}^{-1} S_{4z} | y \rangle = \langle -z | S_{4z} A_z S_{4z}^{-1} | x \rangle = - \langle z | A_z | x \rangle$$
(E.102)

Concluimos então que

$$\langle z | A_z | x \rangle \stackrel{S_{4z}}{=} \langle z | A_z | y \rangle \stackrel{S_{4z}}{=} - \langle z | A_z | x \rangle$$
(E.103)

e portanto

$$\langle z | A_z | x \rangle = \langle z | A_z | y \rangle = 0$$
 (E.104)

Compactando, temos

$$\langle x | A_x | y \rangle = \langle x | A_x | z \rangle = \langle y | A_y | z \rangle = \langle y | A_y | x \rangle = \langle z | A_z | x \rangle = \langle z | A_z | y \rangle = 0$$
(E.105)

Sendo assim, só nos resta agora, calcularmos os elementos de matriz do tipo  $\langle x_i | A_j | x_i \rangle$ , onde vamos inserir a identidade  $C_{2k}^{-1}C_{2k} = 1$  com a restrição,  $j \neq k$ , utilizando as equações (E.5) e (E.6), temos

$$\langle x_i | A_j | x_i \rangle = \langle x_i | C_{2k}^{-1} C_{2k} A_j C_{2k}^{-1} C_{2k} | x_i \rangle = \langle \pm x_i | C_{2k} A_j C_{2k}^{-1} | \pm x_i \rangle = \langle x_i | C_{2k} A_j C_{2k}^{-1} | x_i \rangle \quad (E.106)$$

onde o sinal positivo é referente a escolha i = k e o sinal negativo a  $i \neq k$ . Vemos no entanto, que para qualquer escolha de k, obtemos o mesmo resultado.

Escolhendo agora,  $k \neq j$ , temos que  $C_{2k}A_jC_{2k}^{-1} = -A_j$ , nos dando

$$\langle x_i | A_j | x_i \rangle = - \langle x_i | A_j | x_i \rangle \tag{E.107}$$

e provamos assim que qualquer elemento do tipo  $\langle x_i | A_j | x_i \rangle$  será nulo para quaisquer

$$\mathcal{H}_{SO,(3\times3)}^{\Gamma_{5}^{\nu}\to\Gamma_{5}^{\nu}} = \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\Delta}{3}\hat{z} & i\frac{\Delta}{3}\hat{y} \\ i\frac{\Delta}{3}\hat{z} & 0 & -i\frac{\Delta}{3}\hat{x} \\ -i\frac{\Delta}{3}\hat{y} & i\frac{\Delta}{3}\hat{x} & 0 \end{pmatrix} \cdot \vec{\sigma}$$
(E.108)

Com isso, conseguimos finalmente escrever  $\mathcal{H}_{\text{SO}}$  matricialmente

$$\mathcal{H}_{SO} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\frac{\Delta}{3}\sigma_{z} & i\frac{\Delta}{3}\sigma_{y} \\ 0 & i\frac{\Delta}{3}\sigma_{z} & 0 & -i\frac{\Delta}{3}\sigma_{x} \\ 0 & -i\frac{\Delta}{3}\sigma_{y} & i\frac{\Delta}{3}\sigma_{x} & 0 \end{pmatrix}$$
(E.109)

Somando agora ambas matrizes  $\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_{k,p}, \mathcal{H}_{SO}$  encontramos os elementos de matriz do nosso Hamiltoniano  $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{k,p} + \mathcal{H}_{SO}$  na base  $|s\rangle$ ,  $|x\rangle$ ,  $|y\rangle$ ,  $|z\rangle$ 

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_s & ik_x P & ik_y P & ik_z P \\ -ik_x P & E_p & -i\frac{\Delta}{3}\sigma_z & i\frac{\Delta}{3}\sigma_y \\ -ik_x P & i\frac{\Delta}{3}\sigma_z & E_p & -i\frac{\Delta}{3}\sigma_x \\ -ik_x P & -i\frac{\Delta}{3}\sigma_y & i\frac{\Delta}{3}\sigma_x & E_p \end{pmatrix}$$
(E.110)