



UFAM

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
(PPGFIS - UFAM)**

**TRANSMISSIVIDADE DE SPINS POLARIZADOS EM
DUPLA BARREIRA ASSIMÉTRICA**

José Dilson da Silva Teixeira

**Dissertação apresentada ao
Departamento de Física da
Universidade Federal do A-
mazonas, como parte dos re-
quisitos para a obtenção do
Título de Mestre em Física**

Orientador: Prof. Dr. Antônio Carlos Rodrigues Bittencourt

**MANAUS - AM
2009**



UFAM
UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONASS
INSITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
(PPGFIS-UFAM)

**Transmissividade de Spins Polarizados em Dupla
Barreira Assimétrica**

José Dilson da Silva Teixeira

Orientador: Prof. Dr. Antônio Carlos Rodrigues Bittencourt

MANAUS - AM
2009

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE José Dilson da silva Teixeira APRESENTADA AO DEPARTAMENTO DE FÍSICA DO INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS , DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS, EM 02 DE Abril DE 2009.

Banca Examinadora

Prof. Dr. Antônio carlos Rodrigues Bittencourt (DF/UFAM - AM) - Orientador

Prof. Dra.Marta Silva dos Santos Gusmão (DF/UFAM - AM) - Membro

Prof. Dr. Antônio Carlos Alonge Ramos (UFC/CE-Campus Cariri) - Membro

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho
à minha família, que esteve sempre comigo
mesmo diante de tantas dificuldades.

Em memória do meu avô Raimundo Nonato de Sousa Nunes

Em memória do Prof. Abraham Moysés Cohen

Sonhar renova as águas da esperança.
Nas estações de inverno ou de verão,...
A juventude é o meio dia da vida.
Tudo deve andar às claras.
Na quietura de um sol de virtudes...
A juventude não foi feita para a inércia,
mas para a santidade, através do esforço.
Para a conquista da vida, não há caminho brando
nem é suficiente esforço medíocre.
O segredo de emprestar importância à vida
e às dificuldades durante a vida,
reside na mola do entusiasmo decisivo,
acerca de algo nobre para conquistar.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus o criador de tudo;

Aos meus pais Maria Teixeira e Benedito Teixeira, aos meus irmãos; Bernardo, Gerardo, Marcos, Helio, Marilene, Silvio, Elenize, Ricardo e André pelo carinho e atenção;

Ao Prof. Antônio Carlos Rodrigues Bittencourt, que me orientou, pelo incentivo, amizade, e apoio durante todo este trabalho;

A Prof. Marta Gusmão, mão amiga e instrumento de Deus, minha mais profunda admiração;

Ao meu grande mestre e amigo José Wilson;

Aos Profs. da Pós-Graduação. Em especial ao Prof. Sanderson e José Ricardo,

Aos colegas Edvam Nunes e Luiz Henrique Pacobahyba e à secretária Wania Leite;

A todos que direta e indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Sumário

| | |
|--|-----------|
| Resumo | 7 |
| 1 Introdução | 9 |
| 2 Aproximação da Massa Efetiva | 14 |
| 2.1 Modelo de Uma Banda | 15 |
| 2.2 Modelo para Multibandas | 20 |
| 2.3 Aproximação da Massa Efetiva em Heteroestruturas | 22 |
| 3 Modelo de Dresselhaus e Rashba | 26 |
| 3.1 Método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ | 27 |
| 3.1.1 Representação $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ sem Acoplamento <i>Spin-Órbita</i> | 28 |
| 3.1.2 Representação $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ com Interação <i>Spin-Órbita</i> | 30 |
| 3.2 Aproximação de Kane | 34 |
| 3.3 Hamiltoniano de Dresselhaus | 39 |
| 3.4 Hamiltoniano de Rashba e o Hamiltoniano Total | 41 |
| 4 Transmissividade Dependente do <i>Spin</i> | 43 |
| 4.1 Solução da Equação de Massa Efetiva | 44 |
| 4.1.1 Natureza das Soluções de k_z | 46 |
| 4.2 Formalismo da Matriz de Espalhamento | 49 |
| 4.3 Cálculo dos Coeficientes de Transmissão e da Eficiência de Polarização | 52 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 5 | Resultados da Transmissividade e <i>Spin</i>-Polarização | 55 |
| 5.1 | Tunelamento Dependente de <i>Spin</i> em Dupla Barreira Assimétrica (80,60,50) | 58 |
| 5.1.1 | Transmissividade de <i>Spins</i> Polarizados | 59 |
| 5.1.2 | <i>Spin</i> Polarização | 65 |
| 5.2 | Transmissividade e Polarização para Vários Valores de ϕ | 68 |
| 5.3 | Comparação da Transmissividade e Polarização Dresselhaus x Dresselhaus + Rashba | 75 |
| 6 | Conclusões | 78 |

Lista de Figuras

| | | |
|-----|---|----|
| 1.1 | Transmissividade em função da energia do elétron | 12 |
| 3.1 | Representação esquemática da estrutura de banda dos compostos III-V, na vizinhança do ponto Γ , mostrando a lacuna fundamental (EC) e a energia <i>spin-órbita</i> (Δ). Os símbolos Γ_J , referem-se às representações das funções de Bloch sem <i>spin</i> (à esquerda) e com <i>spin</i> (à direita). Os números em parênteses indicam a degenerescência total em cada caso. | 33 |
| 4.1 | Heteroestrutura com N camadas. A figura mostra os coeficientes das ondas incidentes e das ondas refletidas ou espalhadas em cada região. | 44 |
| 4.2 | Energias críticas E_{C_3} e E_{C_4} em função do parâmetro real k_z , com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 45^\circ$ | 48 |
| 5.1 | Representação esquemática do sistema de dupla barreira assimétrica, mostrando as regiões de interfaces. | 58 |
| 5.2 | Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 30^\circ$ através de heteroestrutura de dupla barreira assimétrica $(80,60,50) \text{ \AA}$ de $InAs/GaSb$, incluindo ambos os termos de interação <i>spin-órbita</i> de Rashba e Dresselhaus, para partícula incidente no estado <i>spin-up</i> (a) e, (b) partícula incidente no estado <i>spin-down</i> . Os demais parâmetros relevantes encontram-se na Tab.(5.1). Os <i>spins up</i> e <i>down</i> ressonantes estão separados por $\sim 6,38$ (meV). | 61 |

| | | |
|-----|---|----|
| 5.3 | Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{ } = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 30^\circ$ através de heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80,60,50)Å de <i>InAs/GaSb</i> , incluindo ambos os termos de interação <i>spin-órbita</i> de Rashba e Dresselhaus, para partícula incidente no estado <i>spin-up</i> (a) e, (b) partícula incidente no estado <i>spin-down</i> . Os demais parâmetros relevantes encontram-se na Tab.(5.1). Os <i>spins up</i> e <i>down</i> ressonantes estão separados por $\sim 14,70$ (meV). . . . | 62 |
| 5.4 | Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{ } = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 30^\circ$ através de heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80,60,50) de <i>InAs/GaSb</i> , incluindo ambos os termos de interação <i>spin-órbita</i> de Rashba e Dresselhaus, para partícula incidente no estado <i>spin-up</i> (a) e, (b) partícula incidente no estado <i>spin-down</i> . Os demais parâmetros relevantes encontram-se na Tab.(5.1).Os <i>spins up</i> e <i>down</i> ressonantes estão separados por $\sim 33,90$ (meV). . . . | 63 |
| 5.5 | (a) mostra a estrutura de bandas para <i>InAs/GaSb</i> , ilustrando a quebra de degenerescência dos estados de <i>spin-up</i> (linha azul) e <i>spin-down</i> (linha vermelha), em função de $k_{ }$ em que $E(k_{\pm}) = E(-k_{\mp})$ devido a simetria de inversão temporal, (b) <i>spin splitting</i> | 64 |
| 5.6 | Polarização em função da energia do elétron para $k_{ } = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{ } = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $k_{ } = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ com $\phi = 30^\circ$ fixo. | 66 |
| 5.7 | Polarização em função do ângulo ϕ com energia inicial $E_0 = 66,7$ meV e $k_{ } = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ | 67 |
| 5.8 | Transmissividade de spins polarizados através da heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80,60,50) de <i>InAs/GaSb</i> em função da energia com $k_{ } = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo e $\phi = 0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 75^\circ$, e 90° , para incidência de <i>spin-up</i> (a) e de <i>spin-down</i> (b). | 69 |

| | | |
|------|--|----|
| 5.9 | Transmissividade de spins polarizados através da heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80, 60, 50) Å de <i>InAs/GaSb</i> em função da energia com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo e $\phi = 45^\circ$ e 135° para incidência de <i>spin-up</i> e <i>spin-down</i> | 70 |
| 5.10 | Transmissividade de spins polarizados através da heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80, 60, 50) Å de <i>InAs/GaSb</i> em função da energia com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo e $\phi = 90^\circ, 105^\circ, 120^\circ, 135^\circ, 150^\circ, 165^\circ$ e 180° , para incidência de <i>spin-up</i> (a) e de <i>spin-down</i> (b). | 71 |
| 5.11 | Polarização em função da energia do elétron para vários valores de ϕ com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo. | 73 |
| 5.12 | Polarização em função da energia do elétron com $\phi = 135^\circ$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ | 74 |
| 5.13 | Transmissividade de spins polarizados (a) através da heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80, 60, 50)Å de <i>InAs/GaSb</i> em função da energia com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 45^\circ$ para incidência de <i>spin-up</i> e de <i>spin-down</i> com os termos de interação <i>spin-órbita</i> de Dresselhaus, (b) Polarização (<i>P</i>) em função da energia do elétron. | 76 |
| 5.14 | Transmissividade de spins polarizados (a) através da heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80, 60, 50)Å de <i>InAs/GaSb</i> em função da energia com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 45^\circ$ para incidência de <i>spin-up</i> e de <i>spin-down</i> com ambos os termos de interação <i>spin-órbita</i> de Dresselhaus e Rashba, (b) Polarização (<i>P</i>) em função da energia do elétron. | 77 |

Lista de Tabelas

| | | |
|-----|--|----|
| 4.1 | Natureza das soluções de kz | 47 |
| 5.1 | Parâmetros de estrutura de banda de semicondutores | 57 |

Resumo

A técnica da matriz de espalhamento é usada para calcular a transmissividade de *spins* polarizados, através de heteroestruturas semicondutoras de dupla barreira assimétrica. O movimento de elétrons de condução são descritos na aproximação da massa efetiva dos modelos de Dresselhaus-Rashba.

A transmissividade e a polarização são calculadas como função da energia do elétron para $k_{\parallel} = 0, 5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{\parallel} = 1, 5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, com vários valores de ϕ , para um sistema InAs/GaSb/InAs/GaSb/InAs. Fixando o momento paralelo k_{\parallel} e variando $\phi = 0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 75^\circ$, e 90° observamos que as posições dos picos ressonantes variam fracamente com a energia e as curvas de transmissão mudam mais fortemente nas regiões fora da ressonância com a polarização atingindo valores entre 10% \rightarrow 82% nos níveis ressonantes. Para as direções $\phi = 45^\circ$ e 135° o *spin mixing* produz uma eficiência de polarização de 100% e os efeitos das interações *spin-órbita* de Dresselhaus e Rashba mostram-se bastante favoráveis à engenharia na fabricação de filtro de *spin* e dispositivos *spintrônicos*.

Abstract

The scattering matrix technique is used to calculate the transmissivity of polarized *spins* through semiconductors heterostructures of asymmetrical double barrier. The movement of electrons is described in the effective mass approach of the Dresselhaus-Rashba models.

The transmissivity and polarization are calculated as a function of electron energy with $k_{\parallel} = 0.5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{\parallel} = 1.5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ varying the angle ϕ InAs/GaSb/InAs/GaSb/InAs system. Fixing the parallel moment k_{\parallel} and varying $\phi = 0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 75^\circ$, and 90° we observed that the positions of the resonant picks vary faintly with the energy and the transmission curves change more strongly in the areas out of the resonance with the polarization reaching values among 10% – 82% in the resonant levels. For the directions $\phi = 45^\circ$ and 135° the *spin* mixing produces an efficiency of polarization of 100% and the effects of the Dresselhaus and Rashba *spin-orbit* interactions are shown quite favorable to the engineered for fabricating of *spin* filters and *spintronics* devices.

Capítulo 1

Introdução

A manipulação ou controle de graus de liberdade intrinsecamente não clássicos - o *spin* do elétron - em sistemas de matéria condensada é um tema extremamente fascinante e atual [1] -[5]. Parte deste fascínio advem da conexão inerente entre este tema e a emergente área da computação quântica. Além do apelo intrínscico devido à conexão com computação quântica, fenômenos dependentes de *spin* em sólidos são de interesse fundamental e aplicado. Do ponto de vista básico pode-se investigar uma variedade de problemas interessantes nos quais o *spin* desempenha papel fundamental: *spin splitting de elétrons em poços quânticos, transmissão dependente de spins em simples e dupla barreira, corrente de spins polarizados e etc...* Sob a ótica de interesse tecnológico, há uma grande expectativa quanto a versatilidade e potencial dos denominados "dispositivos spintrônicos" [1]. Nestes dispositivos o *spin* dos portadores é o elemento relevante para a sua operação, i.é., para o processamento, armazenamento e transmissão de informação. Estes dispositivos inovadores parecem extremamente promissores a médio e longo prazo.

A dinâmica de *spins* polarizados tem atraído grande atenção dos pesquisadores do mundo inteiro nos últimos anos. Grandes esforços teóricos e experimentais estão sendo feitos no campo da criação, conservação e manipulação de *spins* eletrônicos, por vários grupos de pesquisa. Tal área de conhecimento, hoje recebe o nome de *spintrônica*. Nesse contexto, dentre as várias sub-áreas de estudos em Física de semicondutores, a

que trata de acoplamentos do tipo *spin-órbita* em heteroestruturas semicondutoras assumem grande destaque.

Existem dois mecanismos de origem microscópica responsáveis pela interação *spin-órbita*, o acoplamento *Rashba* produzido pela assimetria das barreiras de potencial (SIA) e a de *Dresselhaus* introduzido pela quebra de simetria de inversão espacial no Bulk (BIA) de materiais não centro-simétricos (por exemplo, com estrutura *ZincBlend*); juntos essas interações são responsáveis pela quebra da degenerescência de *spins* à campo zero [7, 8]. Desta forma efeito de separação de *spins* em semicondutores não magnéticos podem ser conseguidos das seguintes formas: por meio da aplicação de um campo elétrico ou magnético externo no sistema, por meio da assimetria das barreiras de potencial, pela formação atômica na região de interface da heteroestrutura ou ainda pela fraca simetria de inversão espacial.

A "revolução do *spin*" ora em curso no meio científico teve início nos primórdios dos anos 90 com *Datta e Das* [8], que propuseram um novo tipo de dispositivo eletrônico, o *spin campo de efeito transistor (spin-FET)* onde a corrente de modulação surgia de uma precessão de *spin* devido ao acoplamento *spin-órbita* de *Rashba* em semicondutores de *gap* estreito, enquanto contatos magnetizados são usados para, preferencialmente, injetar e detectar orientações dos *spins*. Alguns anos depois, em 1999, três experimentos cruciais [9, 10, 11], envolvendo transporte de *spin* polarizado, foram reportados na prestigiada *Nature*. Um destes experimentos que possibilitou a realização dos outros dois, demonstrou pela primeira vez transporte de "pacotes de *spin*" em semicondutores *bulk n-dopados*. Surpreendentemente, os pesquisadores foram capazes de "arrastar" estes pacotes - preservando o *spin* dos mesmos - por distâncias da ordem de $100\mu m$! A idéia do experimento é bastante simples: injeta-se opticamente "pacotes" de *spin* polarizados e movimenta-se os mesmos pela aplicação de um campo elétrico externo. A detecção é feita monitorando-se a fotoluminescência em função do tempo e posição. A preservação do *spin* dos portadores por distâncias microscópicas despertou um grande interesse em comunidades diversas. Esta descoberta fantástica mostrou pela primeira vez a possibilidade

real de se transmitir informações via o *spin* dos portadores.

Nosso objetivo, neste trabalho, é estudar a transmissividade de elétrons polarizados no tunelamento ressonante em heteroestruturas semicondutoras não magnéticas de dupla barreira assimétrica, usando-se a técnica da matriz de espalhamento [12], na aproximação da massa efetiva do modelo de Rashba- Dresselhaus para a interação *spin-órbita*. O termo de Rashba, como já comentamos, é introduzido pela assimetria nas barreiras e o termo de Dresselhaus pela (Assimetria de inversão no Bulk) são considerados em suas formas completas. A interação *spin-órbita* acopla estados de *spin* e o movimento dos elétrons de condução no plano perpendicular a direção de crescimento que abre a possibilidade de polarizar, manipular e detectar *spins* para moderados campos elétricos. O efeito da interação *spin-órbita* de *Rashba* devido a *in-built* ou campos elétricos externos no transporte de *spin* polarizados tem sido investigado em heteroestruturas não magnéticas onde tem sido reportado que a polarização do *spin* atinge de 40% a 50% com moderados campos elétricos [13, 14, 15]. Recentemente *Perel* [16] tem encontrado uma polarização de 20% no caso de heteroestrutura com barreira simples e não magnéticas com fraca simetria de inversão espacial, ou seja, apenas o acoplamento *spin-órbita* de Dresselhaus. Mais recentemente, *K. Gnanasekar e K. Navaneethakrishnan* [17] investigaram o tunelamento de *spins* polarizados em dupla barreiras assimétricas de InAs/GaSb/InAs/GaSb/InAs como função da energia usando o modelo que inclui o combinado efeito de interação *spin-órbita Dresselhaus* linear e *Rashba*. No modelo proposto, o tunelamento dependente de *spin* através da dupla barreira é descrito diagonalizando o Hamiltoniano de *Dresselhaus-Rashba* para $\phi = \pi/4$ (ângulo polar do vetor de onda k no plano das camadas) que permite desacoplar os estados de *spin* com orientações *up* (+) e *down* (-). Usando esse modelo, os autores encontram uma eficiência de polarização entre 75–85% o que sugere que heteroestruturas de dupla barreira assimétrica de InAs/GaSb pode ser usando para a fabricação de *filtro de spins*.

Na Fig.1.1 ilustramos uma heteroestrutura de *dupla barreira assimétrica* que pode funcionar como *filtro de spins*. A mesma apresenta um efeito quântico interessante con-

hecido como tunelamento ressonante, que aparece como picos na curva de transmissividade, quando as energias E da partícula incidente se igualam àsquelas dos estados *quase-ligados*, $E_n(\textit{up ou down})$ da região do poço. Neste trabalho, usando o completo Hamiltoniano (2×2) de Dresselhaus (linear + quadrático e cúbico em \mathbf{k}) e Rashba, investigamos os efeitos da interação *spin -órbita* no transporte de elétrons com *spins* polarizados em dupla barreira assimétrica de InAs/GaSb. Diferente do modelo de *Gnanasekar e Navaneethakrishnan* levamos em conta a mistura de spin (*spin mixing*) entre os estados de condução *up* e *down*. Assim para cada canal de entrada (*up in* ou *down in*) temos dois canais de saída (*up in* e *down in*). O modelo, então, permite o controle da separação de spin (*spin splitting*) e da *eficiência de polarização* através do momento paralelo às camadas e do ângulo ϕ ; quanto maior *spin mixing* (maior valor de k) e maior *spin splitting*. Para $\phi = \pi/4$ encontramos uma eficiência de polarização de, aproximadamente, 100% o que realmente sugere que heteroestruturas assimétricas de InAs/GaSb podem ser usadas para construção de *filtro de spins*.

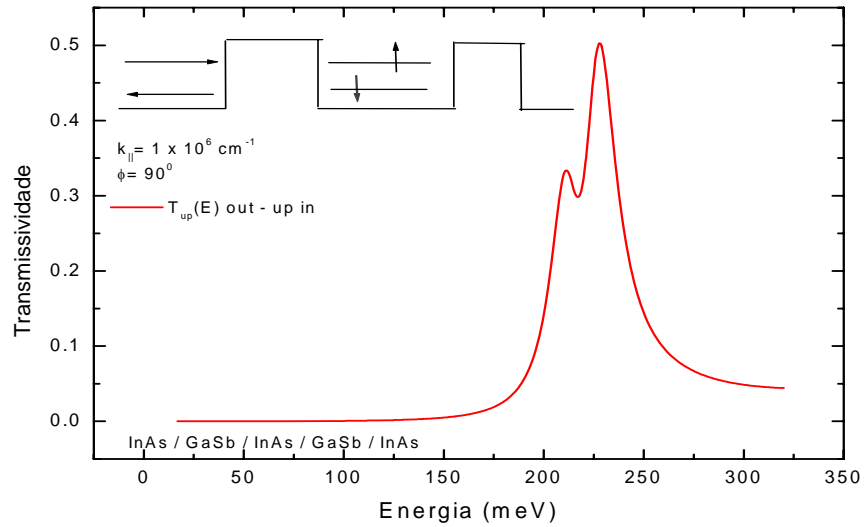


Figura 1.1: Transmissividade em função da energia do elétron

A escolha deste problema para compor o trabalho desta dissertação, deveu-se, basicamente, a natureza analítica das soluções deste problema, de relativa complexidade, permite um bom entendimento de várias técnicas, atualmente, muito utilizadas nesta área de pesquisa, dentre as quais, a aproximação de massa efetiva, matriz de espalhamento, etc., com vistas a futuras aplicações.

Neste trabalho reservamos o Capítulo 2 para uma breve revisão dos aspectos principais da aproximação da massa efetiva para o modelo de uma banda e multibandas. No Capítulo 3, discutimos os modelos de interação *spin-órbita* de *Dresselhaus* e *Rashba* usando o formalismo o $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ dentro da aproximação de massa efetiva.

No Capítulo 4, apresentamos o formalismo da matriz de espalhamento para o cálculo da tranmissividade de *spins* polarizados em *dupla* barreira assimétrica.

No Capítulo 5, apresentamos os resultados numéricos da transmissividade e polarização de *spins* em função da energia do elétron, onde são observados o efeito do vetor de onda k_{\parallel} e do ângulo ϕ . Também neste Capítulo é apresentado um resultado comparativo dos efeitos dos Hamiltonianos de *Dresselhaus* e *Rashba+Dresselhaus*.

No Capítulo 6, apresentamos nossas conclusões e possíveis aplicações futuras.

Capítulo 2

Aproximação da Massa Efetiva

Desde as primeiras investigações sobre as propriedades eletrônicas em heteroestruturas semicondutoras, a aproximação da massa efetiva tem sido o método mais utilizado para descrever o movimento de elétrons num sólido sujeito a campos externos, impurezas, etc., que destroem a simetria de translação do cristal.

A aproximação da massa efetiva, na sua forma geral, consiste em transformar o problema, inicialmente complicado, do movimento de um elétron no cristal, sujeito a um potencial externo adicional, num problema mais simples, correspondente ao movimento do elétron no espaço livre com o mesmo potencial externo, onde todos os efeitos da estrutura cristalina (potencial interno) estão embutidos nos parâmetros que descrevem esta aproximação.

Neste Capítulo, discutiremos o formalismo da aproximação de massa efetiva para o cristal infinito, cujos resultados serão adaptados no Capítulo 4 para o cálculo da transmissividade em heteroestruturas semicondutoras. Desta forma, introduziremos inicialmente na seção (2.1) a aproximação da massa efetiva para um modelo de cristal de uma banda e na seção (2.2) discutiremos a aplicação desta aproximação para o caso de heteroestruturas semicondutoras.

2.1 Modelo de Uma Banda

Considere um cristal infinito com uma banda isolada, cuja extremidade está no ponto $k_0 = 0$. A equação de Schrödinger que descreve o movimento dos elétrons nessa banda é dada por:

$$H_0 \psi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \psi_k(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

onde

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

é o Hamiltoniano do cristal perfeito, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ é o operador momento linear e $\varepsilon(\mathbf{k})$ é a energia do elétron em cada estado rotulado pelo índice \mathbf{k} .

Em 1928, *F. Bloch* demonstrou o importante teorema que afirma que, a solução de Schrödinger para um potencial periódico, Eq.(2.1), deve ter a forma especial:

$$\psi_k(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_k(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

onde $u_k(\mathbf{r})$ é uma função que possui período igual ao da rede cristalina, sendo \mathbf{k} o vetor de onda reduzido, ou seja, restrito a primeira zona de Brillouin.

A função de Bloch, $\psi_k(\mathbf{r})$, pode, também, ser escrita como combinação linear das funções de Wannier $a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ associadas a cada um dos N sítios \mathbf{R}_j , da rede de Bravais e que satisfazem a relação de ortogonalidade [18]:

$$\int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r} = \delta_{ij}. \quad (2.4)$$

Desta forma temos:

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (2.5)$$

Da Eq.(2.5), observa-se que a função de Wannier é a transformada de Fourier inversa

da função de Bloch, portanto invertendo a Eq.(2.5) obtem-se

$$a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \psi_k(\mathbf{r}). \quad (2.6)$$

Vamos agora adicionar ao potencial cristalino, um potencial de perturbação $V(\mathbf{r})$, variando lentamente com a posição dentro de uma célula unitária do cristal, de modo que os elementos de matriz na base de Wannier são dados por:

$$V_{ij} = \int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) V(\mathbf{r}) a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r} \cong V(\mathbf{R}_i) \delta_{ij}. \quad (2.7)$$

O Hamiltoniano do sistema perturbado, $H = H_0 + V(\mathbf{r})$, satisfaz a equação de Schrödinger

$$[H_0 + V(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (2.8)$$

Como o potencial $V(\mathbf{r})$ varia fracamente com a posição, podemos expandir a função de onda do cristal perturbado, $\Psi(\mathbf{r})$, na base de Wannier que contém as características dos sistema não perturbado. Sendo assim obtém-se

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N F(\mathbf{R}_j) a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (2.9)$$

onde as funções $F(\mathbf{R}_j)$ são as chamadas funções envelopes, que dependem fracamente da posição e que modulam as funções de Wannier em cada sítio \mathbf{R}_j .

Substituindo a Eq.(2.9) na Eq.(2.8) e projetando o resultado em um elemento da base de Wannier obtemos

$$\sum_j [(H_0)_{ij} + V_{ij}] F(\mathbf{R}_j) = EF(\mathbf{R}_i), \quad (2.10)$$

onde usamos as condições (2.4) e (2.7), sendo:

$$(H_0)_{ij} = \int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) H_0 a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}, \quad (2.11)$$

os elementos de matriz do Hamiltoniano do cristal perfeito, H_0 , na base de Wannier. podemos ainda escrever

$$(H_0)_{ij} = H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j), \quad (2.12)$$

uma forma que expressa a invariância translacional de H_0 .

Desta maneira, a Eq.(2.10) torna-se

$$\sum_j H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) F(\mathbf{R}_j) + V(\mathbf{R}_i) F(\mathbf{R}_i) = E F(\mathbf{R}_i). \quad (2.13)$$

que é exata, exceto pela aproximação indicada na Eq.(2.7).

Como temos N sítios, a Eq.(2.13) é equivalente a um sistema de N equações relacionadas as N incógnitas $F(\mathbf{R}_j)$. Considerando o fato de que as funções envelopes variam fracamente com a posição e admitindo que as mesmas sejam obtidas dos valores de uma função contínua $F(\mathbf{r})$ para cada sítio, $\mathbf{r} = \mathbf{R}_j$, podemos expandir as quantidades $F(\mathbf{R}_j)$ em série de Taylor em torno do sítio \mathbf{R}_i . Assim sendo obtém-se

$$F(\mathbf{R}_j) = \left[1 + (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) \cdot \nabla + \frac{(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)^2}{2!} \nabla^2 + \dots \right] F(\mathbf{R}_i), \quad (2.14)$$

ou

$$F(\mathbf{R}_j) = e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} F(\mathbf{R}_i), \quad (2.15)$$

onde usamos a substituição formal $\nabla \rightarrow i\mathbf{k}$.

Substituindo a Eq.(2.15) na Eq.(2.13) obtém-se

$$\sum_j H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} F(\mathbf{R}_i) + V(\mathbf{R}_i) F(\mathbf{R}_i) = E F(\mathbf{R}_i). \quad (2.16)$$

Por outro lado, levando a Eq.(2.5) na Eq.(2.1), e projetando o resultado em um elemento $a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ da base de Wannier e utilizando a Eq.(2.12), encontram-se

$$\sum_j H_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} = \varepsilon(\mathbf{k}). \quad (2.17)$$

Usando agora este último resultado na Eq.(2.16), obtém-se:

$$\varepsilon(-i\nabla) F(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}). \quad (2.18)$$

A solução $F(\mathbf{r})$ desta equação nos fornece os coeficientes $F(\mathbf{R}_j)$, para cada sítio $\mathbf{r} = \mathbf{R}_j$.

Como acontece na maioria dos problemas tratados nesta aproximação, é suficiente expandir-se $\varepsilon(\mathbf{k} \rightarrow i\nabla)$ até termos da ordem k^2 , para pontos próximos ao extremo da banda. Assim a Eq.(2.18), que é conhecida como equação da massa efetiva, torna-se semelhante à equação de Schrödinger para uma partícula no espaço livre sujeita ao potencial externo $V(\mathbf{r})$, mas com o operador energia cinética (até a ordem de k^2), da forma

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2.19)$$

onde m^* , conhecida como massa efetiva da partícula - daí o nome da aproximação - contém todas as informações relevantes do potencial periódico. De maneira análoga, podemos interpretar $F(\mathbf{r})$ como as autofunções do elétron naquele potencial.

Convém, agora mostrar, um importante resultado, que estabelece a relação entre a função de onda do sistema perturbado, $\Psi(\mathbf{r})$, e a parte periódica da função de Bloch $u_k(\mathbf{r})$ na extremidade da banda \mathbf{k}_0 (aqui considerado $\mathbf{k}_0 = 0$):

$$\Psi(\mathbf{r}) \cong F(\mathbf{r}) u_0(\mathbf{r}). \quad (2.20)$$

Para isto, vamos expandir a função de onda $\Psi(\mathbf{r})$, dada na Eq.(2.9), em termos das

funções de Bloch, usando a Eq.(2.6), isto é,

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{j,\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} F(\mathbf{R}_j) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.21)$$

Definindo

$$G(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} F(\mathbf{R}_j), \quad (2.22)$$

a Eq.(2.21) pode ser reescrita como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.23)$$

Utilizando-se, então, a função de Bloch $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ dada na Eq.(2.3), podemos reescrever a equação acima como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} G(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.24)$$

Como as funções envelopes $F(\mathbf{R}_j)$ variam muito pouco dentro da célula unitária, podemos escrever, com uma boa aproximação, a Eq.(2.22) na forma

$$G(\mathbf{k}) \cong \frac{1}{\sqrt{N}} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.25)$$

Desta equação, podemos verificar que $G(\mathbf{k})$ é a transformada de Fourier de $F(\mathbf{r})$; e como $F(\mathbf{r})$ tem uma fraca dependência com a posição no espaço real, $G(\mathbf{k})$ é bem concentrada no espaço recíproco \mathbf{k} , ou seja $G(\mathbf{k})$ tem valores apreciáveis somente para $\mathbf{k} \approx 0$. Sendo assim, podemos substituir $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow u_0(\mathbf{r})$ na Eq(2.24), para obtermos

$$\Psi(\mathbf{r}) \cong \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} G(\mathbf{k}) \right] u_0(\mathbf{r}). \quad (2.26)$$

Como $F(\mathbf{r})$ é a transformada de Fourier de $G(\mathbf{k})$, isto é:

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} G(\mathbf{k}), \quad (2.27)$$

podemos reescrever a Eq.(2.26) na forma

$$\Psi(\mathbf{r}) \cong F(\mathbf{r})u_0(\mathbf{r}), \quad (2.28)$$

obtendo assim o resultado desejado.

2.2 Modelo para Multibandas

Vamos agora generalizar os resultados da subseção anterior para um cristal semiconductor infinito com várias bandas acopladas, cujas extremidades ocorrem no ponto $\mathbf{k}_0 = 0$. Suponha, também, que exista um potencial externo, $V(\mathbf{r})$, que varie fracamente com a posição dentro de uma célula unitária centrada em sítio, \mathbf{R}_i , e satisfazendo a uma condição análoga à da Eq.(2.7):

$$V_{\mu\nu}^{ij} = \int a_{\mu}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) V(\mathbf{r}) a_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r} \cong \mathbf{V}(\mathbf{R}_i) \delta_{\mu\nu} \delta_{ij}, \quad (2.29)$$

onde $a_{\mu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ é a função de *Wannier*, para cada banda μ , centrada no sítio $\mathbf{r} = \mathbf{R}_i$.

Expandindo a função de onda do sistema perturbado, $\Psi(\mathbf{r})$, na base de *Wannier*

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j,\nu} F_{\nu}(\mathbf{R}_j) a_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (2.30)$$

Procedendo, então, da mesma maneira como na subseção anterior, obtemos a equação de Schrödinger, análoga a Eq.(2.13)

$$\sum_{j\nu} H_{\mu\nu}^0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) F_{\nu}(\mathbf{R}_j) + V(\mathbf{R}_i) F_{\mu}(\mathbf{R}_i) = E F_{\mu}(\mathbf{R}_i). \quad (2.31)$$

onde, devido a simetria de translação do cristal perfeito, podemos escrever

$$H_{\mu\nu}^0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = (H_0)_{\mu\nu}^{ij} \equiv \int a_{\mu}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) H_0 a_{\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}. \quad (2.32)$$

Como as funções envelope dependem fracamente da posição, podemos expandir as componentes $F_{\nu}(\mathbf{R}_j)$ em série de *Taylor* em torno do sítio \mathbf{R}_i , isto é :

$$F_{\nu}(\mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} F_{\nu}(\mathbf{R}_i), \quad (2.33)$$

onde $\mathbf{k} \Leftrightarrow -i\nabla$.

Substituindo esse resultado na Eq.(2.31) e usando-se o análogo da Eq.(2.17) para multibandas:

$$H_{\mu\nu}^0(\mathbf{k}) = \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} H_{\mu\nu}^0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j), \quad (2.34)$$

obtemos

$$\sum_{\nu} [H_{\mu\nu}^0(\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla) + V(\mathbf{R}_i) \delta_{\mu\nu}] F_{\nu}(\mathbf{R}_i) = E F_{\mu}(\mathbf{R}_i), \quad (2.35)$$

que é a generalização da equação de massa efetiva para o modelo de multibandas.

Admitindo-se, como na subseção anterior, que as funções envelope $F_{\nu}(\mathbf{R}_j)$ podem ser obtidas a partir de uma função contínua $F_{\nu}(\mathbf{r})$, a equação de massa efetiva pode ainda ser escrita como:

$$\sum_{\nu} [H_{\mu\nu}^0(\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla) + V(\mathbf{R}_i) \delta_{\mu\nu}] F_{\nu}(\mathbf{R}_i) = E F_{\mu}(\mathbf{R}_i). \quad (2.36)$$

Utilizando o procedimento idêntico ao da subseção anterior podemos mostrar que a função de onda, $\Psi(\mathbf{r})$, do sistema perturbado depende da função de Bloch no extremo da seguinte forma:

$$\Psi(\mathbf{r}) \cong \sum_{\nu} F_{\nu}(\mathbf{r}) u_{\nu 0}(\mathbf{r}). \quad (2.37)$$

Nesta seção, descrevemos o formalismo que leva à aproximação de massa efetiva para

um cristal infinito perturbado. Na próxima seção estaremos discutindo algumas aproximações, visando a utilização deste método para o cálculo das propriedades de transporte.

2.3 Aproximação da Massa Efetiva em Heteroestruturas

Considere uma heteroestrutura composta por dois semicondutores A e B , com simetria *zincblend*, crescida na direção z . A técnica mais utilizada no crescimento desses sistemas são a epitaxial por feixe molecular (MBE-Molecular Beam Epitaxy) e "metal-organic chemical vapour deposition" (MOCVD), que permite obter interfaces de alta qualidade entre cada material na escala de uma camada atômica ($\sim 2,8 \text{ \AA}$) para o $GaAs$ [19]. Com uma boa aproximação, consideramos que as interfaces entre os semicondutores diferentes sejam bidimensionais, o que implica que os vetores de onda $k_{\parallel} = (k_x, k_y)$ são bons números quânticos (são conservados através da interface) para o sistema.

Nos próximos desenvolvimentos utilizaremos a aproximação que consiste em desprezar a formação de dipolos devido a acumulação de cargas nas interfaces e consideramos o movimento dos elétrons em camadas isoladas como aproximadamente igual ao do cristal perfeito formado por aquele material, independentemente das condições de contorno que as funções envelopes devam satisfazer. Esta aproximação é conhecida como aproximação de banda plana ou *flat band approximation*.

Seguindo estas aproximações, devido à diferença dos *gaps* dos materiais ($E_g^{(B)} \neq E_g^{(A)}$) consideramos numa interface, que a energia na direção z apresentará uma descontinuidade,

$$\delta E_c + \delta E_v = \delta E_g, \quad (2.38)$$

onde δE_c e δE_v medem, respectivamente, a descontinuidade das bandas de condução e de valência no ponto Γ . Desta forma, crescendo uma heteroestrutura com uma sequência de camadas alternadas $ABAB\dots$, os portadores, nesses materiais (elétrons), estarão sujeitos

a um perfil de potencial consistindo de poços e barreiras, semelhante ao problema de uma partícula em um potencial unidimensional. Entretanto, outras formas de interfaces são possíveis variando de forma controlada a composição dos materiais e que permitiria obter estruturas diversas como: poços quânticos com potenciais triangulares e parabólicos, estrutura "delta-doping" etc... (*Band-gap engineering*).

Como no esquema da aproximação de massa efetiva o potencial interno $V(\mathbf{r})$ não produz acoplamento (isto é, na ausência de campos magnéticos ou de *strains*) entre as bandas, de modo que podemos considerar $\delta E_\nu = V(\mathbf{r}) = \text{constante}$. Desta forma, para encontrarmos os autoestados na heteroestrutura temos que resolver a equação de massa efetiva dentro de cada camada j , isto é :

$$\sum_{\nu} [H_{\mu\nu}^{(j)}(\mathbf{K} \rightarrow -i\nabla) + V(\mathbf{r})\delta_{\mu\nu}] F_{\nu}(\mathbf{r}) = EF_{\mu}^{(j)}(\mathbf{r}), \quad (2.39)$$

com $j = A$ ou B e, então, estabelecer condições de contorno (continuidade) que as funções envelopes devam satisfazer nas interfaces. A função de *Bloch*, em cada camada, toma a forma da Eq. (2.37),

$$\Psi^{(j)}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} F_{\nu}^{(j)}(\mathbf{r})u_{\nu 0}^{(j)}(\mathbf{r}). \quad (2.40)$$

Assim, usamos o fato de que a função $\Psi^{(j)}(\mathbf{r})$ deve ser contínua em todo o sistema. Entretanto, essa condição não é suficiente para relacionar as funções envelope diretamente, como pode ser visto claramente da Eq. (2.40), sendo necessário o conhecimento das funções de *Bloch* $u_{\nu 0}^{(j)}(\mathbf{r})$ em cada material, o que extrapola o domínio da aproximação da massa efetiva.

Neste trabalho, estamos interessados no estudo das propriedades de transporte em heteroestrutura do tipo *I*, onde as regiões de confinamento dos portadores (elétrons) ocorrem no mesmo material. Como ambos os materiais, que formam a heteroestrutura, apresentam o *gap* exatamente no ponto Γ ($k_0 = 0$), admitiremos que as componentes da

função de *Bloch* u_0 sejam iguais em todas as regiões, isto é:

$$u_{\nu 0}^{(A)} = u_{\nu 0}^{(B)}, \quad (2.41)$$

o que restringe a aplicação do método a heteroestruturas formadas com materiais com mesma estrutura cristalina [20].

Desta forma, usando a ortogonalidade das funções de *Bloch* e a continuidade de $\Psi^{(j)}(\mathbf{r})$ na interface $z = z_i$ obtemos a relação:

$$F_{\nu}^{(A)}(\boldsymbol{\rho}, z_i) = F_{\nu}^{(B)}(\boldsymbol{\rho}, z_i), \quad (2.42)$$

que representa a continuidade das funções envelopes nas interfaces, sendo $\rho = (x, y)$ a componente bidimensional do vetor \mathbf{r} no plano xy das camadas.

Admitindo a invariância translacional do sistema no plano xy (ou seja, conservação do momento linear k_{ρ}), as funções envelopes em cada camada podem ser reescritas como:

$$F_{\nu}^{(j)}(\boldsymbol{\rho}, z) = \exp(i\mathbf{k}_{\rho} \cdot \boldsymbol{\rho}) F_{\nu}^{(j)}(z), \quad (2.43)$$

o que resulta em uma equação de massa efetiva multibandas cuja forma matricial é dada por:

$$[H^{(j)}(k_z \rightarrow -i\partial/\partial z) + \mathbf{IV}(\mathbf{r})]\mathbf{F}^{(j)}(z) = E\mathbf{F}^{(j)}(z). \quad (2.44)$$

Uma segunda condição de contorno é a continuidade da corrente de probabilidade, que pode ser obtida integrando-se a equação de massa efetiva através de uma pequena região, δ , em torno da interface que, no limite $\delta \rightarrow 0$, toma a forma

$$J_z \mathbf{F}_v^{(A)}(z_i) = J_z \mathbf{F}_v^{(B)}(z_i), \quad (2.45)$$

onde J_z é o operador densidade de corrente que será definido no Capítulo 4.

Uma vez obtida a equação de massa efetiva que descreve o movimento dos porta-

dores (elétrons) em heteroestrutura semicondutoras o passo seguinte é escolher o melhor Hamiltoniano para descrever adequadamente as propriedades do cristal perfeito visando a obtenção de bons resultados uma vez que estamos interessados no efeito de *spin-órbita*. Para isto, optamos pelos modelos de *Dresselhaus* em sua forma completa e *Rashba* para investigarmos a transmissividade de elétrons, na aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. No próximo Capítulo discutiremos os modelos de interação *spin-órbita* na aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

Capítulo 3

Modelo de Dresselhaus e Rashba

Para compreendermos as propriedades eletrônicas em heteroestruturas semicondutoras sujeitas a interações *spin-órbita*, torna-se essencial um modelo razoável para calcularmos a estrutura eletrônica. Vários formalismos tem sido utilizados no cálculo da estrutura eletrônica, como a aproximação *Tight-Binding* [21], *Pseudopotenciais* [22], *Densidade Funcional*, etc. Além da complexidade inerente de cada um deles, os altos custos computacionais podem limitar a utilização prática dos mesmos a um grupo reduzido de locais com infraestrutura computacional necessária.

Em vista dessas dificuldades, nessa dissertação optamos pelo Hamiltoniano completo de *Rashba-Dresselhaus*, baseado no método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, para descrever as propriedades de transporte de *spins* polarizados em dupla barreira assimétrica, uma vez que o mesmo é fácil adaptação ao esquema da massa efetiva.

Nesse Capítulo, apresentamos, de forma qualitativa, o formalismo usado neste trabalho para o cálculo da transmissividade de elétrons polarizados da banda de condução em heteroestruturas de dupla barreira assimétrica. Inicialmente será feita uma descrição do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, método este muito utilizado para o estudo de bandas em semicondutores, que descreve o movimento do elétron no cristal perfeito em suas representações sem interação *spin-órbita* e, posteriormente, com interação *spin-órbita*. Em seguida apresentamos a aproximação de *Kane* usada para simplificação dos cálculos no estudo das propriedades

eletrônica de semicondutores, que é baseada no método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ onde o mesmo é tratado perturbativamente, através de uma teoria de perturbação desenvolvida por *Löwdin*. O Hamiltoniano total, é a soma do Hamiltoniano de Dresselhaus com o Hamiltoniano de Rashba. O Hamiltoniano de Dresselhaus, que considera o acoplamento *spin-órbita* em sua forma completa, gerado a partir da assimetria de inversão de espacial no bulk(BIA) será tratado neste capítulo, assim como o Hamiltoniano de Rashba (SIA) introduzido pela assimetria de inversão espacial no sistema.

3.1 Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

Inicialmente utilizado para determinar massas efetivas e funções de onda próximo a pontos de alta simetria no espaço- k , o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ introduzido por *Bardeen* [23] e *Seitz* [24], tornou-se uma técnica atraente para o cálculo de estrutura de bandas em semicondutores. Isto se deve ao fato de que as propriedades eletrônicas usuais, tais como, tunelamento, absorção óptica, etc...dependem fortemente dos detalhes da estrutura de banda na vizinhança de seus extremos, permitindo aproximações específicas e com simplificações nos cálculos que não comprometem os detalhes dos estados numa dada vizinhança.

Em linhas gerais, o procedimento básico para o cálculo de bandas através do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [25] envolve três etapas: (i) transformação do Hamiltoniano do cristal para uma representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, que incorpora detalhes da estrutura de bandas na vizinhança do ponto $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$; (ii) redução ao problema matricial de autovalores, usando como base as funções de onda no ponto \mathbf{k}_0 para se obter formalmente a matriz do passo anterior; (iii) introdução de aproximações, visando a utilização prática desses resultados. Por simplicidade de exposição, convém tratarmos aqui o Hamiltoniano do cristal perfeito, separadamente na presença, ou não de interação *spin-órbita*.

3.1.1 Representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ sem Acoplamento *Spin-Órbita*

Na aproximação de partículas independentes, a função de onda de um portador no cristal semiconductor é obtida resolvendo a equação de *Schrödinger*

$$H_0 \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) \right] \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

onde m_0 é a massa do elétron livre, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ é o operador momento linear e $U(\mathbf{r})$ é o potencial cristalino (periódico) que descreve a interação entre os íons do cristal, incluindo até alguma média da interação elétron-elétron. Devido a periodicidade do potencial cristalino podemos fazer uso do teorema de *Bloch* e as soluções da equação acima devem ser da forma:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

onde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é a parte periódica da função de *Bloch* $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, com o mesmo período de $U(\mathbf{r})$ e \mathbf{k} é o vetor de onda que descreve o movimento do portador no cristal. Como \mathbf{k} deve ser real (estados estendidos), as energias com vetor de onda \mathbf{k} dentro da primeira zona de *Brillouin* são quantizadas, na forma $E_n(\mathbf{k})$, onde n é o índice que classifica esta função em várias bandas de energia.

Substituindo a função de *Bloch*, Eq.(3.1), e multiplicando ambos os lados por $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ na equação de *Schrödinger*, obtemos

$$H(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.3)$$

onde definimos, o Hamiltoniano

$$H(\mathbf{k}) \equiv H_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}} = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{2m_0} k^2 \right], \quad (3.4)$$

a representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ do Hamiltoniano H_0 .

A Eq.(3.3), representa uma equação de autovalores para $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ no pequeno volume de uma célula unitária do cristal, onde essas funções são normalizadas e, como $H_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}$

é um operador Hermitiano, espera-se um número infinito de soluções, com autovalores discretos, classificados pelo número quântico n , o índice de banda.

Vale ainda ressaltar que o vetor de onda \mathbf{k} que aparece na equação de autovalores apenas como parâmetro e podemos concluir que, para cada valor deste parâmetro e particularmente para $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ as funções $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ formam um conjunto completo, sendo úteis como base para a formulação do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Sendo assim, supomos agora, que $E_n(\mathbf{k}_0)$ e $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ sejam soluções conhecidas num ponto de referência $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, satisfazendo a Eq.(3.3), isto é:

$$H(\mathbf{k}_0) u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}_0) u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}), \quad (3.5)$$

com

$$H(\mathbf{k}_0) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{2m_0} k_0^2. \quad (3.6)$$

Comparando as equações (3.4) e (3.6), podemos concluir que o Hamiltoniano $H(\mathbf{k})$, em qualquer ponto \mathbf{k} , pode ser representado numa forma que contenha $H(\mathbf{k}_0)$, o que permite reescrever a equação de autovalores (3.3) na forma

$$\left\{ H(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{2m_0} (\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right\} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.7)$$

A próxima etapa é transformar esta equação, num sistema matricial de autovalores. Para isto expande-se as funções $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ na base completa $\{u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})\}$ das autofunções de $H_0(\mathbf{k}_0)$

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} c_{nn'} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (3.8)$$

Dessa forma, substituindo esta expansão na Eq. (3.3) e projetando o resultado em um estado particular, $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, obtém-se uma equação para os coeficientes, $c_{nn'}$,

$$\sum_{n'} \left\{ \left[E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k^2 - k_0^2) \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'}(\mathbf{k}_0) \right\} c_{nn'} = E_n(\mathbf{k}) c_{nn}, \quad (3.9)$$

$$\mathbf{p}_{nn'}(\mathbf{k}_0) = \int u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3.10)$$

são os elementos de matriz do operador momento linear, entre os estados de *Bloch* no ponto \mathbf{k}_0 , calculados no volume da célula unitária da rede de Bravais do cristal.

Vemos, portanto, que a Eq. (3.10) relaciona a energia de uma certa banda $E_n(\mathbf{k})$, num ponto \mathbf{k} da primeira zona de *Brillouin*, à uma matriz Hamiltoniano efetivo cujos elementos são dados por:

$$H_{ij} = \left[E_i(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0}(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right] \delta_{ij'} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{ij}(\mathbf{k}_0). \quad (3.11)$$

Uma vez que a matriz do Hamiltoniano efetivo é de dimensão infinita, não é possível a sua diagonalização exata. Entretanto, para os materiais que estamos interessados e seus tipos de propriedades eletrônicas de maior interesse, podemos tratar os elementos fora da diagonal da matriz Eq.(3.9), como uma perturbação. Usando uma teoria de perturbação desenvolvida por *Löwdin* [26], *Kane* observou que uma escolha adequada de estados $u_{n\mathbf{k}_0}$, simplificaria o problema de forma a restringi-lo na busca de soluções para uma matriz de dimensão finita. Antes de abordarmos essa aproximação, vamos descrever na próxima subseção representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ com interação *spin-órbita*.

3.1.2 Representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ com Interação *Spin-Órbita*

Na discussão até aqui desenvolvida, ignorou-se o acoplamento *spin-órbita*, uma vez que todos os operadores envolvidos eram independentes desta variável. Na grande maioria dos semicondutores, porém, a interação *spin-órbita* é muito importante, sendo fundamental para comparações com resultados experimentais, uma vez que níveis, inicialmente degenerados, podem ser desdobrados com a presença desta interação, resultando num espectro muito diferente daquele, sem essa interação.

Esta interação que provém da perturbação que o *spin* do elétron sofre devido ao campo magnético provocado pela sua órbita em torno do núcleo, tem a forma:

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}[\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{p}, \quad (3.12)$$

sendo $\nabla U(\mathbf{r})$ o gradiente do potencial cristalino e $\boldsymbol{\sigma}$ as matrizes de Pauli

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (3.13)$$

que operam nas variáveis de *spin*. Dessa forma adicionando a interação *spin-órbita*, H_{SO} , ao Hamiltonino $\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r})\right]$ e procedendo da mesma forma que a subseção anterior, encontramos

$$H(\mathbf{k}) \equiv H_{\mathbf{k},\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{2m_0}k^2 + \frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + H_{so1} + H_{so2}, \quad (3.14)$$

onde

$$H_{so1} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}[\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{p}, \quad (3.15)$$

$$H_{so2} = \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}[\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r})] \cdot \mathbf{k}, \quad (3.16)$$

Como aproximação, vamos desprezar o termo H_{so2} , que depende do vetor de onda \mathbf{k} cuja magnitude é pequena se comparada ao termo H_{so1} . Vê se isto, a grosso modo, nas equações acima, onde a contribuição para o termo de H_{so1} , vinda essencialmente da velocidade do elétron em órbita atômica, é muito maior do que a velocidade de uma partícula com momento \mathbf{k}_0 próximo ao extremo (ponto Γ), o termo H_{so2} é, certamente muito pequeno, podendo ser desprezado na maioria dos cristais com simetria *zincblende*.

Portanto, considerando essas aproximações teremos a Eq.(3.9) na forma:

$$\sum_{n'} \left\{ \left[E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0}(k^2 - k_0^2) \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'}(\mathbf{k}_0) + H_{s_{nn'}} \right\} c_{n'} = E_n(\mathbf{k}) c_{nn}, \quad (3.17)$$

sendo

$$H_{s_{nn'}} = \int u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) H_{so1} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3.18)$$

Em geral, os elementos de matriz da interação *spin-órbita* resulta na separação dos níveis degenerados $E_n(k)$ mesmo para $\mathbf{k} = 0$. Isso é ilustrado na Fig.2.1 onde mostramos a estrutura de bandas dos semicondutores que se cristalizam na estrutura *zincblend*. A estrutura de bandas desses semicondutores mostra que os extremos das bandas de condução e de valência ocorrem no ponto $\Gamma(\mathbf{k} = 0)$, onde se define o *gap* fundamental do semicondutor, E_g . Neste ponto, na ausência de *spin*, o ramo mais baixo da banda de condução é não-degenerada e a banda de valência possui tripla degenerescência. A interação *spin-órbita* quebra parcialmente a degenerescência na banda de valência, separando um dos ramos, conhecido como a banda de buraco separado ou *split-off* (SO), dos outros dois que permanecem degenerados no ponto Γ , denominados como as bandas de buraco pesado *heavy-hole* (HH) e de buraco leve *light-hole* (LH).

Análise detalhada da simetria das estruturas *zincblend* revelam que, na ausência de *spin*, a parte periódica da função de *Bloch* para a banda de condução é um função-s, indicando que tem propriedades de simetria de um orbital com momento angular $\mathbf{L} = \mathbf{0}$ sob operações de simetria do grupo tetraédrico T_d^2 ; esta função $|s\rangle$ pertence ao tipo de simetria $\Gamma_1(\Gamma_6$, na presença de *spin*). O topo da banda de valência é formada por orbitais ligantes tipo *p*, indicando que as funções de *Bloch* no topo da banda de valência transformam-se da mesma forma que as funções atômicas $|x\rangle, |y\rangle$ e $|z\rangle$, de momento angular $\mathbf{L} = 1$, sob as operações de simetria que pertencem à representação $\Gamma_4(\Gamma_7$ e Γ_8 na presença de *spin*).

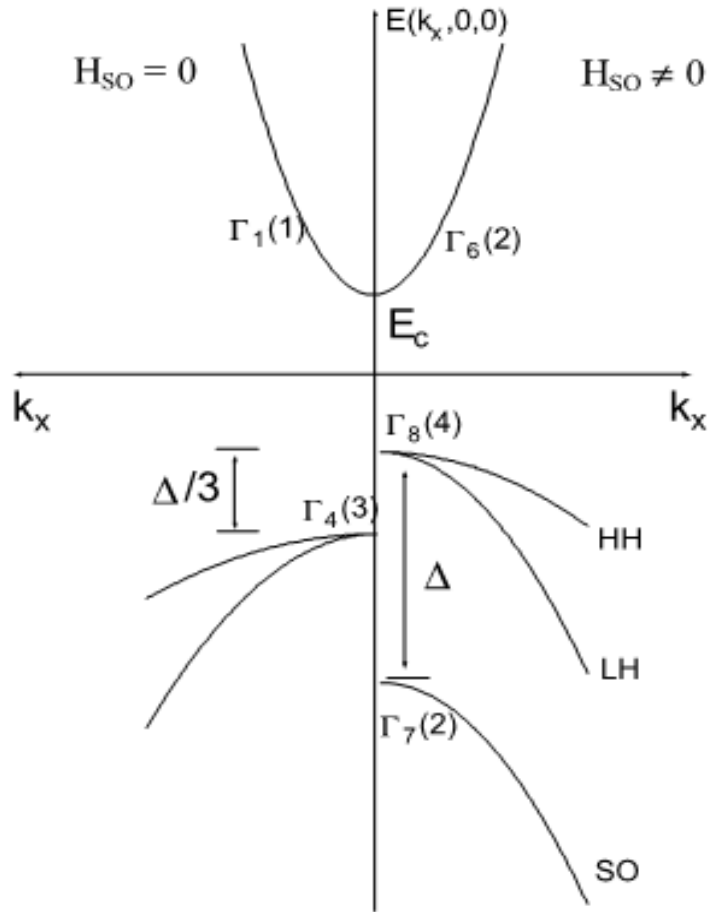


Figura 3.1: Representação esquemática da estrutura de banda dos compostos III-V, na vizinhança do ponto Γ , mostrando a lacuna fundamental (E_C) e a energia *spin-órbita* (Δ). Os símbolos Γ_J , referem-se às representações das funções de Bloch sem *spin* (à esquerda) e com *spin* (à direita). Os números em parênteses indicam a degenerescência total em cada caso.

3.2 Aproximação de Kane

A localização das partículas (elétrons e buracos) nas proximidades do ponto Γ , ($\mathbf{k} = 0$) das bandas de condução e valência, torna esta faixa de energia muito importante para o estudo das propriedades eletrônicas nos semicondutores, além de permitir considerável simplificação nos cálculos das bandas de energia desses materiais. Em vista disto, e das considerações anteriores, concentramos nossa atenção na região do ponto Γ , onde ocorrem esses extremos.

Assim sendo, partindo do Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, Eq.(3.11) tomando como ponto de referência $\mathbf{k}_0 = 0$, obtemos

$$H_{ij} = \left[E_i(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{ij} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{ij}(\mathbf{k}_0). \quad (3.19)$$

Na aproximação adotada por *Kane*, o Hamiltoniano na Eq.(3.19) é tratado perturbativamente, através de uma teoria de perturbação desenvolvida por *Löwdin*. Ao contrário da teoria de perturbação ordinária, que tenta diagonalizar um Hamiltoniano, usando somente processo iterativo, no método de *Löwdin* este esquema é usado apenas parcialmente, com o objetivo de remover as interações, entre os níveis pertencentes a diferentes categorias, A e B , em que os estados originais são convenientemente selecionados. Em consequência deste tratamento, as interações entre os estados na mesma categoria A , até segunda ordem de perturbação, tornam-se

$$h'_{ij} \simeq h_{ij} + \sum_{\alpha} \frac{h_{i\alpha} h_{\alpha j}}{h_{ii} - h_{\alpha\alpha}}, \quad \{i, j \in A, \alpha \in B\}, \quad (3.20)$$

sendo h_{mn} os elementos de matriz do Hamiltoniano inicial, como aquele na Eq.(3.11). Com destaque, observamos que, nesse esquema de cálculo, as interações entre os estados no mesmo subespaço A (por hipótese, as mais importantes) são tratadas exatamente, tornando-se assim, muito conveniente a utilização desta teoria.

Aplicando este procedimento ao Hamiltoniano na Eq.(3.19) após selecionarmos os

estados de condução e valência, para a categoria A (subespaço $s - p$), obtem-se a matriz das interações renormalizadas:

$$\mathcal{H}'(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} A & B & C & D \\ B^* & E & F & G \\ C^* & H & I & J \\ D^* & G & J & K \end{bmatrix}, \quad (3.21)$$

sendo

$$\begin{aligned} A &= E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \\ B &= B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{x}}) + iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}), \\ C &= B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{y}}) + iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{y}}), \\ D &= B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{z}}) + iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{z}}), \\ B^* &= B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{x}}) - iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}), \\ C^* &= B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{y}}) + iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{y}}), \\ D^* &= B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{z}}) + iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{z}}), \\ E &= E_v + Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \\ F &= Nk_x k_y, \\ G &= Nk_x k_z, \\ H &= Nk_x k_y, \\ I &= E_v + Lk_y^2 + M(k_y^2 + k_z^2) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \\ J &= Nk_y k_z, \\ K &= E_v + Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \end{aligned}$$

onde $\mathbf{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y} + k_z \hat{z}$, $\mathbf{q} = k_y k_z \hat{x} + k_z k_x \hat{y} + k_x k_y \hat{z}$, $P_0 = \frac{\hbar}{m_0} \langle s|p_x|x \rangle$ e B_0 é dado por:

$$B_0 = 2 \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_j^{\Gamma_{15}} \frac{\langle s | p_x | u_j \rangle \langle u_j | p_y | z \rangle}{[(E_c + E_v)/2 - E_j]}. \quad (3.22)$$

que é o parâmetro responsável pela quebra de simetria de inversão.

Para completar o Hamiltoniano de *Kane*, convém agora considerarmos o *spin* do elétron e introduzirmos algumas notações, que serão úteis nesse estudo. Assim, partindo do Hamiltoniano dado pela Eq.(3.19), podemos mostrar que o efeito dessa variável é duplicar cada nível derivado da Eq. (3.21), uma vez que o Hamiltoniano aqui considerado independente do *spin* é diagonal nos estados dos dois estados do operador $S = 1/2$. Desta forma considerando esses estados, usualmente representados na base $\{| \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle\}$, os autoestados de S_z , o subspaço $s - p$ torna-se octodimensional e o Hamiltoniano de *Kane* toma a forma:

$$H'' = \begin{bmatrix} \mathcal{H}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathcal{H}' \end{bmatrix}, \quad (3.23)$$

escrito na base $v_1 = |s \uparrow\rangle$, $v_2 = |x \uparrow\rangle$, $v_3 = |y \uparrow\rangle$, $v_4 = |z \uparrow\rangle$ e as demais na, v_5, v_6, v_7 e v_8 , igualmente obtidas, combinando os orbitais $s - p$ com o estado $| \downarrow \rangle$ na mesma sequência.

Para completar o modelo de *Kane*, incluímos agora a interação *spin-órbita* seguindo o mesmo procedimento usado por Cohen [27], isto é tratando a interação dentro do subspaço $s - p$, incluindo somente a parte não renormalizada da teoria de *Löwdin*, correspondente ao primeiro termo da Eq.(3.20). Dessa forma a partir da Eq. (3.18) obtemos os elementos de matriz com interação *spin-órbita*

$$H_{so} = -\frac{\Delta}{3} \begin{bmatrix} H_{\alpha\alpha} & H_{\alpha\beta} \\ -H_{\alpha\beta}^* & H_{\alpha\alpha}^* \end{bmatrix}, \quad (3.24)$$

onde

$$H_{\alpha\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$H_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 1 & -i & 0 \end{bmatrix},$$

e

$$\Delta = -3/(\hbar/4m_0^2c^2) \langle x | (\vec{\nabla} \times \vec{p})_y | z \rangle. \quad (3.25)$$

Assim, o Hamiltoniano total com a inclusão da interação *spin-órbita* é da forma:

$$H(\mathbf{k}) = H''(\mathbf{k}) + H_{so}. \quad (3.26)$$

Com o objetivo de simplificar o modelo, dando um interpretação simples ao parâmetro Δ , transforma-se H para a base $|J, M_j\rangle$, dos autoestados do momento angular total, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, onde a matriz H_{so} é diagonal. Para isto, constroem-se combinações lineares dos orbitais $s-p$ ($L = 0$ e $L = 1$), com as funções de *spin* $\mathbf{S} = 1/2$: para $\mathbf{L} = 0$, existem dois estados, $|1/2, 1/2\rangle$ e $|1/2, -1/2\rangle$, ambos pertencentes a representação Γ_6 ; para $\mathbf{L} = 1$, dos seis estados possíveis, dois deles, $|1/2, 1/2\rangle$ e $|1/2, -1/2\rangle$ pertencem à Γ_7 , enquanto os demais, $|3/2, 3/2\rangle$, $|3/2, -1/2\rangle$, $|3/2, -1/2\rangle$ e $|3/2, -3/2\rangle$, possuem

simetria da representação Γ_8 , desta maneira , define-se a base $\{u_{n0}; n = 1, 8\}$:

$$\begin{aligned}
u_{10} &\equiv |1/2, 1/2 \rangle_{\Gamma_6} = |s \uparrow \rangle, \\
u_{20} &\equiv |3/2, 3/2 \rangle_{\Gamma_8} = -\frac{1}{\sqrt{2}}|(x + iy) \uparrow \rangle, \\
u_{30} &\equiv |3/2, 1/2 \rangle_{\Gamma_8} = -\frac{1}{\sqrt{6}}|(x + iy) \downarrow - 2z \uparrow \rangle, \\
u_{40} &\equiv |1/2, 1/2 \rangle_{\Gamma_7} = \frac{1}{\sqrt{3}}|(x + iy) \downarrow - z \uparrow \rangle, \\
u_{50} &\equiv |1/2, -1/2 \rangle_{\Gamma_6} = -|s \downarrow \rangle, \\
u_{60} &\equiv |3/2, -3/2 \rangle_{\Gamma_8} = -\frac{1}{\sqrt{2}}|(x - iy) \downarrow \rangle, \\
u_{70} &\equiv |3/2, -1/2 \rangle_{\Gamma_8} = \frac{1}{\sqrt{6}}|(x - iy) \uparrow + 2z \downarrow \rangle, \\
u_{80} &\equiv |1/2, -1/2 \rangle_{\Gamma_7} = \frac{1}{\sqrt{3}}|(x - iy) \uparrow - z \downarrow \rangle.
\end{aligned}$$

Fazendo o mesmo procedimento acima o Hamiltoniano total na representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ na base acima citada na ordem $|s \uparrow \rangle, -|s \downarrow \rangle, |3/2, 3/2 \rangle, |3/2, 1/2 \rangle, |3/2, -1/2 \rangle, |3/2, -3/2 \rangle, |1/2, +1/2 \rangle, |1/2, -1/2 \rangle$ pode ser escrito na seguinte forma [28]:

$$H_{8 \times 8}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \tilde{H}_u & \tilde{H}_{ud} \\ \tilde{H}_{ud}^\dagger & \tilde{H}_d \end{bmatrix}. \quad (3.27)$$

$$\tilde{H}_d = \begin{bmatrix} P - Q & -D & -\frac{\sqrt{3}}{2}D^* & \sqrt{2}Q \\ -D^* & P + Q & -\sqrt{2}C^* & \frac{D^*}{\sqrt{2}} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}D & -\sqrt{2}C & P - \Delta & 0 \\ \sqrt{2}Q & \frac{D}{\sqrt{2}} & 0 & P - \Delta \end{bmatrix}, \quad \tilde{H}_{ud} = \begin{bmatrix} \frac{R^*}{\sqrt{3}} & T^* & C^* & 0 \\ 0 & R^* & 0 & C^* \\ \frac{T^*}{\sqrt{2}} & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}S^* & \frac{D^*}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}Q \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}R^* & -\frac{T^*}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}C^* & -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}D^* \end{bmatrix},$$

onde * denotam o conjugado Hermitiano, sendo:

$$\begin{aligned}
A &= E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}, \\
S &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \langle iS|H|X + iY \rangle, \\
R &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle iS|H|X - iY \rangle, \\
T &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \langle iS|H|Z \rangle, \\
C &= -\frac{1}{2\sqrt{3}} \langle X + iY|H|X - iY \rangle, \\
D &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \langle X + iY|H|Z \rangle, \\
P &= \frac{1}{3} \langle X + iY|H|X + iY \rangle + \frac{1}{3} \langle Z|H|Z \rangle, \\
Q &= \frac{1}{6} \langle X + iY|H|X + iY \rangle - \frac{1}{3} \langle Z|H|Z \rangle.
\end{aligned}$$

Na próxima seção, obteremos o modelo de interação *spin-órbita* de *Dresselhaus* (2×2) que descreve os elétrons de condução, a partir da bloco-diagonalização do Hamiltoniano de *Kane* (8×8), que é baseado no método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, dentro da aproximação de massa efetiva.

3.3 Hamiltoniano de Dresselhaus

O Hamiltoniano de *Kane* na Eq.(3.27) pode ser blocodiagonalizado [29] tal que as bandas de valência e condução são desacopladas. Assim o Hamiltoniano para a banda de condução até a ordem k^3 pode ser escrito na forma

$$H_{2 \times 2}^c = H_0 + H_D, \quad (3.28)$$

onde

$$H_{2 \times 2}^c = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \end{bmatrix} + H_D, \quad (3.29)$$

e

$$H_D = \alpha_D [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)], \quad (3.30)$$

é o Hamiltoniano de Dresselhaus. Na expressão acima, σ_x , σ_y , σ_z denotam as componentes das matrizes de *spin* de Pauli e α_D corresponde ao parâmetro *spin-splitting* da banda de condução.

Fazendo as devidas substituições, obtemos o seguinte:

$$H_D^L = \begin{pmatrix} 0 & \alpha_1(k_{\parallel}, \phi) k_z^2 \\ \alpha_1^*(k_{\parallel}, \phi) k_z^2 & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_1(k_{\parallel}, \phi) = \alpha_D k_{\parallel} e^{i\phi}. \quad (3.31)$$

$$H_D^Q = \begin{pmatrix} -\alpha_2(k_{\parallel}, \phi) k_z & 0 \\ 0 & \alpha_2(k_{\parallel}, \phi) k_z \end{pmatrix} \quad \alpha_2(k_{\parallel}, \phi) = \alpha_D k_{\parallel}^2 \cos(2\phi). \quad (3.32)$$

$$H_D^C = \begin{pmatrix} 0 & \alpha_3(k_{\parallel}, \phi) k_z^2 \\ \alpha_3^*(k_{\parallel}, \phi) k_z^2 & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_3(k_{\parallel}, \phi) = \alpha_D k_{\parallel}^3 [e^{i\phi} - e^{-i3\phi}]/4. \quad (3.33)$$

que são os termos de ordem linear, quadrático e cúbico em k_{\parallel} , respectivamente, de *Dresselhaus*. Assim o Hamiltoniano de *Dresselhaus* em sua forma completa é descrito por:

$$H_D = H_D^L + H_D^Q + H_D^C. \quad (3.34)$$

Na seção seguinte será feita a descrição do Hamiltoniano de Rashba, importante contribuição a formação do nosso modelo completo.

3.4 Hamiltoniano de Rashba e o Hamiltoniano Total

Em heteroestruturas semicondutoras, a degenerescência de *spin* pode ser quebrada não somente por causa da assimetria de inversão espacial no bulk do cristal perfeito (BIA), mas também por causa da assimetria de inversão na estrutura do potencial $V(\mathbf{r})$ de confinamento. Este potencial pode conter um potencial embutido ou um potencial externo, como também um potencial efetivo dependente da posição da extremidade da banda. Recentemente, experimentos tem mostrado que o SIA *spin-splitting* pode ser continuamente controlada por uma perturbação externa [30, 31].

Podemos expandir $V(\mathbf{r})$ em série de Taylor,

$$V(\mathbf{r}) = V_0 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} + \dots, \quad (3.35)$$

isto é, para a mais baixa ordem, a assimetria de inversão de $V(\mathbf{r})$ pode ser caracterizada por um campo elétrico \mathbf{E} . Desta forma para baixa ordem em \mathbf{k} e \mathbf{E} o SIA *spin-splitting* da banda de condução é dada pelo termo de *Rashba* [32, 33],

$$H_R = \alpha (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

onde α é prefator específico do material [34, 35]. Considerando $\mathbf{E} = (\mathcal{E}_Z \hat{z})$ e usando as matrizes de Pauli, obtemos

$$H_R = \langle \alpha \mathcal{E}_Z \rangle \begin{bmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.36)$$

onde $k_+ = k_x + ik_y$, $k_- = k_x - ik_y$ e $\alpha_R = \langle \alpha \mathcal{E}_Z \rangle$ corresponde a um valor médio do coeficiente de Rashba no material do poço e da barreira e pode ser determinado analisando as oscilações de Shubnikov-de Haas[36, 37, 38, 39]. Dessa forma obtemos

$$H_R = \begin{bmatrix} 0 & \alpha_R (k_x + ik_y) \\ \alpha_R (k_x - ik_y) & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.37)$$

e sendo $k_x = k_{\parallel} \cos \phi$ e $k_y = k_{\parallel} \sin \phi$, têm-se

$$H_R = \begin{bmatrix} 0 & \alpha_R k_{\parallel} e^{i(\pi/2-\phi)} \\ \alpha_R k_{\parallel} e^{-i(\pi/2-\phi)} & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.38)$$

Com base nos desenvolvimentos efetuados nas seções anteriores, podemos agora e escrever nosso Hamiltoniano total, que constitui-se como a somatória dos efeitos de interação de *spin-órbita* de *Rashba* e *Dresselhaus* em sua forma completa, dessa forma temos

$$H_T = H_0 + H_D + H_R, \quad (3.39)$$

onde H_D é o Hamiltoniano descrito na Eq.(3.34) e H_R é o Hamiltoniano de Rashba descrito na Eq.(3.38). Assim sendo, podemos escrever o Hamiltoniano Total como

$$H_T = \begin{bmatrix} H_{++} & H_{+-} \\ H_{-+} & H_{--} \end{bmatrix}, \quad (3.40)$$

onde

$$\begin{aligned} H_{++} &= \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) k_z^2 + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) k_{\parallel} + \alpha_D k_{\parallel}^2 \cos 2\phi k_z, \\ H_{--} &= \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) k_z^2 + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) k_{\parallel} - \alpha_D k_{\parallel}^2 \cos 2\phi k_z, \\ H_{+-} &= (i\alpha_R k_{\parallel} e^{-i\phi} - \alpha_D k_{\parallel} e^{i\phi} k_z^2 + ik_{\parallel}^3 \alpha_D \cos \phi \sin \phi e^{-i\phi}), \\ H_{-+} &= (i\alpha_R k_{\parallel} e^{-i\phi} - \alpha_D k_{\parallel} e^{i\phi} k_z^2 + ik_{\parallel}^3 \alpha_D \cos \phi \sin \phi e^{-i\phi})^*. \end{aligned}$$

sendo $H_{+-} = H_{-+}^\dagger$.

No próximo Capítulo apresentaremos o formalismo da matriz de espalhamento (analítico) que incorpora, de forma muito simples, os efeitos nas interfaces e que estamos inicialmente explorando para o cálculo do transporte em múltiplas barreiras.

Capítulo 4

Transmissividade Dependente do *Spin*

Neste Capítulo, vamos discutir o cálculo da transmissividade de elétrons com *spins* polarizados, no tunelamento ressonante em sistemas de dupla barreira assimétrica, usando o formalismo da matriz de espalhamento na aproximação de massa efetiva do modelo de *Dresselhaus-Rashba*.

O procedimento para a aplicação desta técnica consiste basicamente de três etapas. (a) resolve-se o problema eletrônico no cristal perfeito, correspondente a cada região do sistema, determinando-se as energias e funções de onda de partícula (ondas planas, no caso de potencial constante); (b) a partir dessas funções de onda, constroem-se combinações lineares em cada região, fixando-se os valores de energia e do momento paralelo k_{\parallel} ; e (c) os coeficientes dessas combinações lineares são, então, relacionados, usando-se as condições de contorno apropriadas em cada interface do sistema. Desta maneira, é possível relacionar os coeficientes das combinações lineares nas regiões do coletor e emissor, obtendo-se daí a matriz de espalhamento. A seguir, discutiremos cada uma dessas etapas para a construção da matriz de espalhamento.

4.1 Solução da Equação de Massa Efetiva

A técnica da matriz de espalhamento [16], por definição, consiste em relacionar os coeficientes das ondas que incidem nas interfaces de uma heteroestrutura ($\mathbf{a}_0, \mathbf{b}_n$), [veja a Fig. 4.1] com os coeficientes das ondas que são espalhadas (refletidas), ($\mathbf{a}_n, \mathbf{b}_0$), mais precisamente

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_n \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

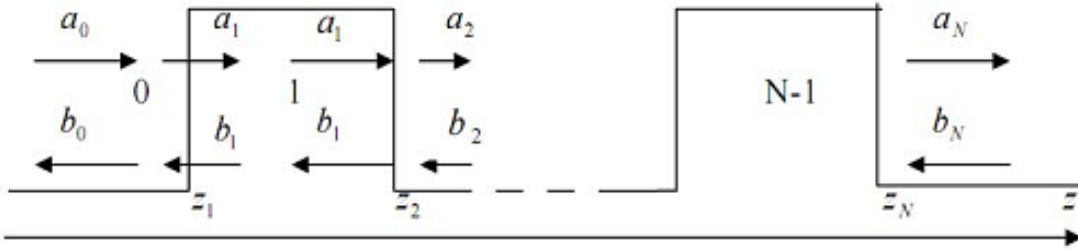


Figura 4.1: Heteroestrutura com N camadas. A figura mostra os coeficientes das ondas incidentes e das ondas refletidas ou espalhadas em cada região.

O primeiro procedimento básico para a obtenção da matriz de espalhamento, na aproximação de massa efetiva, é resolver a equação de massa efetiva no cristal perfeito (*bulk*) para um determinado valor de energia E , momento paralelo k_{\parallel} e ângulo ϕ e, então, determinam-se as funções envelopes $F_{\sigma=\uparrow,\downarrow}(k_z, k_{\parallel}, \phi)$, para cada tipo de polarização σ , \uparrow (*up*), \downarrow (*down*). A equação da massa efetiva no cristal perfeito é dado por:

$$HF(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

onde H é o Hamiltoniano total dado pela Eq. (3.40) e $\mathbf{F}(r) = (F_{\uparrow}, F_{\downarrow})$ são as funções envelopes com duas componentes *up* e *down*. Devido a simetria de translação do cristal,

podemos escrever $F(\mathbf{r})$ da seguinte forma:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (4.3)$$

Substituindo a Eq.(4.3) na Eq.(4.2) obtemos a equação de massa efetiva para os estados de *spin-up* ou *spin-down*

$$HF_\sigma(\mathbf{k}) = EF_\sigma(\mathbf{k}). \quad (4.4)$$

A Eq.(4.4) pode ainda ser escrita como:

$$(H - E\mathbf{I}) \mathbf{F}_\sigma(\mathbf{k}) = 0, \quad (4.5)$$

que tem solução não trivial quando

$$\det(H - E\mathbf{I}) = 0, \quad (4.6)$$

A forma explícita dos autovetores $F_\sigma(\mathbf{k})$ para as energias dada na Eq.(4.5) é encontrada facilmente, resolvendo-se a equação de autovalores, Eq.(4.2),

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_\uparrow \\ F_\downarrow \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} F_\uparrow \\ F_\downarrow \end{bmatrix}, \quad (4.7)$$

agrupando os termos e resolvendo o sistema, obtemos as seguintes soluções para os autovetores:

$$\mathbf{F}_\uparrow(k_z, k_\parallel, \phi) = \frac{1}{\sqrt{(H_{22} - E)^2 + (-H_{21})^2}} \begin{pmatrix} H_{22} - E \\ -H_{21} \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

para *spin-up* e,

$$\mathbf{F}_\downarrow(k_z, k_\parallel, \phi) = \frac{1}{\sqrt{(-H_{11} + E)^2 + (H_{12})^2}} \begin{pmatrix} H_{12} \\ -(H_{11} - E) \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

para *spin-down*. As soluções da Eq. (4.6) nos fornece a relação de dispersão para os estados *up*(+) e *down*(-) :

$$E_{\pm}(k_{\parallel}, k_z, \phi) = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_{\parallel}^2, k_z^2) \pm \sqrt{\gamma(k_{\parallel}, k_z, \phi) + \delta(k_{\parallel}, \phi)}, \quad (4.10)$$

onde as quantidades $\gamma(k_{\parallel}, k_z)$ e $\delta(k_{\parallel})$ são, respectivamente,

$$\gamma(k_{\parallel}, k_z, \phi) = \alpha_D^2 k_{\parallel}^4 k_z^2 \cos(4\phi) + \alpha_D^2 k_{\parallel}^2 k_z^4 - 2\alpha_D \alpha_R k_{\parallel}^2 k_z^2 \sin(2\phi), \quad (4.11)$$

$$\delta(k_{\parallel}, \phi) = \alpha_R^2 k_{\parallel}^2 + \frac{1}{4} \alpha_D^2 k_{\parallel}^6 \sin^2(2\phi) + \alpha_D \alpha_R k_{\parallel}^4 \sin(2\phi), \quad (4.12)$$

o ângulo ϕ é medido do eixo cristalino (1, 0) no plano xy .

No esquema de cálculo para a obtenção da matriz de espalhamento, o parâmetro k_z é uma quantidade importante para a construção das funções de onda em cada região da heteroestrutura. Dessa forma, reservamos a próxima subseção para uma análise detalhada da natureza de k_z no *bulk*, cujas informações teóricas nos serão úteis para o cálculo numérico da transmissividade.

4.1.1 Natureza das Soluções de k_z

Para $k_{\parallel} \neq 0$, o esquema de cálculo para a obtenção da matriz de espalhamento, requer, como vimos anteriormente, expressar k_z em termos de E , k_{\parallel} e ϕ . Para isto, usando a Eq.(4.10) e, isolando k_z , obtemos a seguinte expressão

$$k_{z\sigma}^2 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad (4.13)$$

onde

$$a = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) - \alpha^2 k_{\parallel}, \quad (4.14)$$

$$b = 2 \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) k_{\parallel} + 2\alpha\beta_0 k_{\parallel} \sin(2\phi) - 2 \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) E - \alpha^2 k_{\parallel} \cos^2(2\phi) + \frac{\alpha^2 k_{\parallel}}{2} [1 - \cos(4\phi)], \quad (4.15)$$

$$c = E^2 - 2E \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) k_{\parallel} + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) k_{\parallel} - \delta(k_{\parallel}). \quad (4.16)$$

e o sinal (+) e (-) correspondem, respectivamente, aos valores de $k_{z\uparrow}$ e $k_{z\downarrow}$.

Diferentemente do modelo parabólico, os valores de $k_{z\uparrow}$ e $k_{z\downarrow}$ nem sempre são reais na região do poço e imaginários na região da barreira, mas dependem das magnitudes de k_x , k_y e E . De fato, fixando-se k_x , k_y , ϕ e E na Eq.(4.10) e impondo-se as condições necessárias para termos soluções reais ou complexas, encontramos para quais intervalos de energia essas condições se verificam, dependendo do tipo de entrada, se *spin-up* ou *spin-down* no coletor, fato este que se reflete diretamente no cálculo da transmissividade ou da corrente de tunelamento em heteroestruturas. Assim procedendo, as condições mencionadas acima, podem ser representadas por duas superfícies de energias críticas no plano $x - y$ (E_{c3} e E_{c4}), assim definidas:

$$E_{c3,4}(k_x, k_y) = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \pm \sqrt{\beta^2 k_{\parallel}^2 + \frac{1}{4} \alpha_0^2 k_{\parallel}^6 \sin^2(2\phi) + \alpha_0 \beta k_{\parallel}^4 \sin(2\phi)}. \quad (4.17)$$

dividindo todo o espectro de energia em duas regiões (*i*) e (*ii*).

Para cada região de energia considerada, k_z tem seguintes soluções, descritas na Tab.(4.1)

| Região | Energia | $k_z \downarrow$ | $k_z \uparrow$ |
|-----------|-----------------------|------------------|-----------------|
| <i>i</i> | $E > E_{c4}$ | real (positivo) | real (positivo) |
| <i>ii</i> | $E_{c4} > E > E_{c3}$ | real (positivo) | imaginário puro |

Tabela 4.1: Natureza das soluções de k_z

Com o objetivo de ilustrar as energias críticas definidas anteriormente, mostramos na Fig. 4.2, o gráfico com os cortes dessas superfícies no plano k_x e $k_y = 0$ para o material InAs/Gasb.

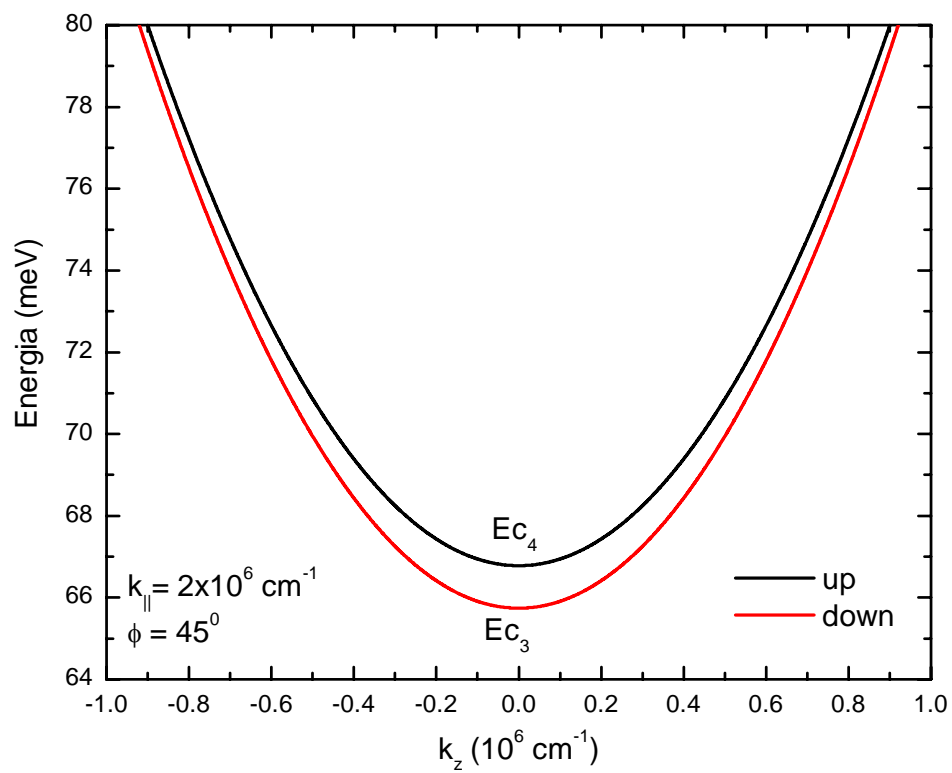


Figura 4.2: Energias críticas E_{C_3} e E_{C_4} em função do parâmetro real k_z , com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 45^\circ$.

4.2 Formalismo da Matriz de Espalhamento

O segundo passo para a obtenção da matriz de espalhamento é a construção da função de onda total em cada região da heteroestrutura. A partir das soluções da equação de massa efetiva no cristal perfeito, a função de onda tal em cada camada l da heteroestrutura é obtida, tomando-se combinações lineares dessas soluções com o mesmo valor de energia, E , ϕ , e do momento paralelo às camadas, $k_{\parallel} = (k_x, k_y)$. Como o potencial $V(z)$ quebra a simetria de translação na direção z , a função de onda em cada camada pode ser escrita como

$$\mathbf{F}(z) = \sum_{\sigma(\uparrow, \downarrow)} [a_{l,\sigma} \mathbf{F}_{\sigma}(+k_{z\sigma}) e^{+ik_{z\sigma}(z-z_l)} + b_{l,\sigma} \mathbf{F}_{\sigma}(-k_{z\sigma}) e^{-ik_{z\sigma}(z-z_l)}], \quad (4.18)$$

aqui, omitimos a onda plana $\exp(ik_{\parallel}\rho)$, pois k_{\parallel} se conserva no processo de tunelamento.

Aplicando as condições de contorno na interface $n + 1$, ou seja, a conservação da densidade de probabilidade e da densidade de corrente

$$\begin{aligned} F(z_j) |_{z_j} &= \text{contínuo}, \\ J_z F(z_j) |_{z_j} &= \text{contínuo}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

Seguindo a discussão na [29], os coeficientes de transmissão são calculados, usando-se a definição para o operador densidade de corrente na teoria $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ é dada por:

$$J_z = \frac{1}{\hbar} (H^{(2)} + H^{(1)}), \quad (4.20)$$

onde $H^{(2)}$ são os elementos do Hamiltoniano total proporcionais a k_z^2 e $H^{(1)}$ são os elementos proporcionais a k_z . Dessa forma encontramos

$$J_z(k_{\parallel}, k_z, \phi) = \begin{bmatrix} j_{++} & j_{-+} \\ j_{+-} & j_{--} \end{bmatrix}, \quad (4.21)$$

onde

$$j_{\sigma\sigma} = \frac{\hbar k_z}{m^*} + \frac{\sigma\alpha_2(k_{\parallel}, \phi)}{\hbar}, \quad (4.22)$$

representam a conservação corrente de polarização de *spin*, e

$$j_{+-} = -\frac{2m^*}{\hbar} + \alpha_1(k_{\parallel}, \phi)k_z. \quad (4.23)$$

Assim, usando as condições de contorno para uma interface n podemos encontrar a seguinte equação matricial

$$\begin{pmatrix} (\mathbf{M}_n)_{11} & (\mathbf{M}_n)_{12} \\ (\mathbf{M}_n)_{21} & (\mathbf{M}_n)_{22} \end{pmatrix}_{4 \times 4} \times \begin{pmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\mathbf{M}_{n+1})_{11} & (\mathbf{M}_{n+1})_{12} \\ (\mathbf{M}_{n+1})_{21} & (\mathbf{M}_{n+1})_{22} \end{pmatrix}_{4 \times 4} \times \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{n+1} \\ \mathbf{b}_{n+1} \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

onde a matriz \mathbf{M} de dimensão 2×2 dão os elementos que formam a matriz de transferência usual [40].

$$M = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\uparrow}^+ & \mathbf{F}_{\downarrow}^+ & \mathbf{F}_{\uparrow}^- & \mathbf{F}_{\downarrow}^- \\ \mathbf{J}_{z\uparrow}^+ \mathbf{F}_{\uparrow}^+ & \mathbf{J}_{z\downarrow}^+ \mathbf{F}_{\downarrow}^+ & \mathbf{J}_{z\uparrow}^- \mathbf{F}_{\uparrow}^- & \mathbf{J}_{z\downarrow}^- \mathbf{F}_{\downarrow}^- \end{bmatrix}, \quad (4.25)$$

onde usamos uma notação comprimida para os elementos na forma $\mathbf{F}_{\uparrow\downarrow}^{\pm} \equiv \mathbf{F}_{\uparrow\downarrow}(\pm k_{z\uparrow\downarrow})$ para as funções envelope e $\mathbf{J}_{z\uparrow\downarrow}^{\pm} \equiv \mathbf{J}_{z\uparrow\downarrow}(\pm k_{z\uparrow\downarrow})$ para o vetor densidade de corrente. Sendo que, \mathbf{a}_n é o vetor que representa a amplitude da onda incidente para os estados de *spin up* e *down* e \mathbf{b}_n a amplitude da onda refletida. A partir da Eq.(4.24) e com alguma longa manipulação algébrica, podemos relacionar os coeficientes das ondas espalhadas numa interface (\mathbf{a}_{n+1} e \mathbf{b}_n) com os das ondas incidentes (\mathbf{a}_n e \mathbf{b}_{n+1}), na forma

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{n+1} \\ \mathbf{b}_n \end{pmatrix} = \mathbf{S}_{n+1} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_{n+1} \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

sendo

$$\mathbf{S}_{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n+111} & -\mathbf{M}_{n12} \\ \mathbf{M}_{n+121} & -\mathbf{M}_{n22} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n11} & -\mathbf{M}_{n+112} \\ \mathbf{M}_{n21} & -\mathbf{M}_{n+122} \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

a matriz de espalhamento para a interface $n + 1$.

Aplicando as condições de contorno nas interfaces localizadas nas posições $z = z_1$ e $z = z_2$, obtemos :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_1 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix}, \quad (4.28)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}'_1 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Na região 1 [Fig.4.1], os coeficientes $(\mathbf{a}'_1, \mathbf{b}_1)$ das ondas que saem e os coeficientes das ondas que entram nesta região $(\mathbf{a}_1, \mathbf{b}'_1)$ estão relacionados da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_1 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}'_1 \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

sendo

$$\mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} e^{ik_z \uparrow d} & & & \\ & e^{ik_z \downarrow d} & & \\ & & e^{-ik_z \uparrow d} & \\ & & & e^{-ik_z \downarrow d} \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

a matriz de espalhamento na região 1 de largura d . Os valores k_z são vetores de onda ao longo da direção z , de propagação, que são obtidos através da relação de dispersão dos respectivos estados, como $k_z = f(E, k_{\parallel}, \phi)$ [40].

Das Eqs. (4.29) e (4.30), obtém-se a relação

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

onde o símbolo \otimes é usado para denotar a composição em série de duas matrizes, cuja regra do produto é dada em [28]. Da mesma forma usando as Eqs.(4.28) e (4.32) podemos combinar \mathbf{S}_1 e $\mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2$, obtendo-se assim:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}. \quad (4.33)$$

Aplicando as condições de contorno nas outras interfaces e sempre combinando os coeficientes das ondas chegando e saindo para cada estágio da heteroestrutura assimétrica encontraremos para duplas barreiras

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_4 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \otimes \mathbf{P}_2 \otimes \mathbf{S}_3 \otimes \mathbf{P}_3 \otimes \mathbf{S}_4 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_4 \end{pmatrix}, \quad (4.34)$$

onde

$$\mathbf{S}_T = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \otimes \mathbf{P}_2 \otimes \mathbf{S}_3 \otimes \mathbf{P}_3 \otimes \mathbf{S}_4, \quad (4.35)$$

é a matriz de espalhamento total.

Na próxima seção definiremos os coeficientes de transmissão de *spins* polarizados em dupla barreira assimétrica.

4.3 Cálculo dos Coeficientes de Transmissão e da Eficiência de Polarização

Uma vez determinados os coeficientes das funções envelopes, que determinam as funções de onda das heteroestruturas como combinações lineares das funções do *bulk*, vamos calcular a transmissividade de elétrons polarizados num sistema de dupla barreira assimétrica, através do formalismo da matriz de espalhamento. A transmissividade através de um sistema desse tipo é uma medida que permite determinar os níveis *quase-ligados* na região do poço, uma vez que a energia da partícula, em ressonância com esses níveis, dá origem a picos (ou máximos de intensidades) na curva da transmissividade. Por esse motivo, a técnica da matriz de espalhamento tem sido muito usada para calcular os níveis de energia em poços quânticos.

Seguindo a discussão usada por Bittencourt [41], os coeficientes de transmissão são calculados, usando-se a definição para a corrente de probabilidade

$$j_{z\sigma} = \text{Re} \left(\mathbf{F}_\sigma^\dagger \mathbf{J}_{z\sigma} \mathbf{F}_\sigma \right). \quad (4.36)$$

A densidade de corrente de probabilidade no emissor vale:

$$j_z^e = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (j_{z\sigma}^+ + j_{z\sigma}^-)_0, \quad (4.37)$$

onde $j_{z\sigma}^+$ é a densidade de corrente de probabilidade incidente e $j_{z\sigma}^-$ é a densidade de corrente de probabilidade refletida (ou espalhada), seguindo a notação $\mathbf{F}(\pm k_z)$, introduzida anteriormente. De acordo com a Eq.(??), as expressões para essas correntes são:

$$[j_{z\sigma}^+]_0 = |a_0^\sigma|^2 \text{Re}[\mathbf{F}_\sigma^\dagger(+k_{z\sigma}) \mathbf{J}_{z\sigma} (+k_{z\sigma}) \mathbf{F}_\sigma(+k_{z\sigma})],$$

para região 0. Por outro lado a densidade de corrente transmitida vale (região 4)

$$[j_{z\sigma}^+]_4 = |a_4^\sigma|^2 \text{Re}[\mathbf{F}_\sigma^\dagger(+k_{z\sigma}) \mathbf{J}_{z\sigma} (+k_{z\sigma}) \mathbf{F}_\sigma(+k_{z\sigma})].$$

Levando-se em conta o carácter estacionário do sistema, a transmissividade é definida como a razão entre o fluxo de corrente de probabilidade transmitida (região 4), j^{out} , e a incidente j^{in} ,

$$T_{\sigma \rightarrow \sigma'}(E, k_{\parallel}, \phi) = \Re \left[(t_{\sigma'}^\sigma)^* (t_{\sigma'}^\sigma) \frac{\langle \mathbf{F}_{\sigma'}^+ | \mathbf{J}_{z\sigma'}^+ | \mathbf{F}_{\sigma'}^+ \rangle_{z=z_4}}{\langle \mathbf{F}_\sigma^+ | \mathbf{J}_{z\sigma}^+ | \mathbf{F}_\sigma^+ \rangle_{z=z_0}} \right], \quad (4.38)$$

onde os coeficientes $t_{\sigma'}^\sigma = a_4^{\sigma'}/a_0^\sigma$ são obtidos através da matriz de espalhamento, Eq.(4.34).

A partir do cálculo da transmissividade podemos calcular a eficiência de polarização de *spin* P através da diferença da transmissividade dos estados de *spins* \uparrow (*up*) e \downarrow (*down*)

para todos os canais de entrada \uparrow (*up*) e \downarrow (*down*)

$$P = \frac{(T_{\uparrow\rightarrow\uparrow} + T_{\downarrow\rightarrow\uparrow}) - (T_{\uparrow\rightarrow\downarrow} + T_{\downarrow\rightarrow\downarrow})}{(T_{\uparrow\rightarrow\uparrow} + T_{\downarrow\rightarrow\uparrow}) + (T_{\uparrow\rightarrow\downarrow} + T_{\downarrow\rightarrow\downarrow})}. \quad (4.39)$$

No próximo Capítulo discutiremos os resultados numéricos para o cálculo da transmissividade bem como a polarização em sistemas de dupla barreira assimétrica obtidos a partir do formalismo até aqui desenvolvido. Em todos os casos ali relatados, escolhemos o sistema formado por camadas de *InAs* (poço) e *GaSb* (barreira), que tem seus parâmetros de massa efetiva bem conhecidos.

Capítulo 5

Resultados da Transmissividade e Spin-Polarização

Antes de discutirmos os resultados numéricos derivados das expressões analíticas para a transmissividade em heteroestruturas, desenvolvidas nos capítulos anteriores, convém recapitularmos a metodologia para o cálculo dessa quantidade, que é baseado na técnica da matriz de espalhamento dentro da aproximação de massa efetiva. De um modo geral, esta técnica consiste em relacionar os coeficientes das ondas que incidem nas interfaces de uma heteroestrutura (veja a Fig. 4.1) com os coeficientes das ondas que são espalhadas (refletidas). Essas ondas são obtidas das combinações lineares das funções envelopes derivadas das soluções da equação da massa efetiva para o *bulk* do material de cada camada da heteroestrutura, com k_z , o vetor de onda na direção de crescimento, obtido da expressão da energia, fixando-se os valores de E e do módulo do vetor de onda paralelo às camadas, $k_{||}$, parâmetros estes que se conservam no processo de tunelamento coerente. Todo o processo de cálculo pode ser resumido no seguinte procedimento:

a) inicialmente, resolve-se analiticamente a equação da massa efetiva no cristal perfeito (*bulk*) para um determinado valor de energia obtendo-se então os autovalores e autovetores (funções envelopes) para cada tipo de partícula. A partir da expressão da energia, deriva-se as quatro soluções para o vetor de onda na direção- z , satisfazendo às

condições $k_z = f(E, k_{\parallel})$, sendo duas das soluções para *spin-up* ($\pm k_{z\uparrow}$) e duas *spin-down* ($\pm k_{z\downarrow}$). As duas funções envelopes, obtidas das soluções da equação da massa efetiva, são $\mathbf{F}_{\uparrow}(k_{\parallel}, k_{z\uparrow}, \phi)$, $\mathbf{F}_{\downarrow}(k_{\parallel}, k_{z\downarrow}, \phi)$, para os *spin-up* e *spin-down*, correspondentes aos estados de base $|1/2, 1/2\rangle$, $|1/2, -1/2\rangle$, respectivamente;

b) em seguida, constrói-se a função de onda total em cada região n da heteroestrutura como combinação linear de quatro ondas planas, correspondentes às duas soluções $\mathbf{F}(k_{\parallel}, k_{z\sigma}, \phi)$, substituindo-se $k_{z\sigma} = \pm k_{z\uparrow}$, $\pm k_{z\downarrow}$ para um dado valor de E e fixando-se $k_{\parallel} = (k_x, k_y)$;

c) finalmente, usam-se as duas condições de contorno em cada interface, isto é, uma que nos garante a condição de continuidade da função de onda total e a outra, a conservação da densidade de probabilidade de corrente, obtendo-se daí uma equação matricial, que relaciona os coeficientes das ondas incidentes com os coeficientes das ondas refletida através da matriz de espalhamento. Resolvendo-se essa equação matricial obtém-se os coeficientes de transmissão t_{σ}^{σ} .

No esquema de cálculo acima descrito, devemos, a princípio, conhecer os coeficientes de entrada (\mathbf{a}_0), da partícula na região de incidência, o que significa estabelecermos as condições iniciais para o movimento. Cada um desses coeficientes está relacionado com o tipo de estado *spin-up* ou *spin-down*, ou uma mistura destes, dependendo da escolha inicial da partícula incidente. Assim, por exemplo, para uma partícula incidente no estado tipo *spin-up* os coeficientes de entrada são $(1, 0)$; por outro lado, se incidirmos uma partícula no estado *spin-down* os coeficientes de entrada são $(0, 1)$.

Após este breve resumo da metodologia usada no cálculo da transmissividade dentro do formalismo da matriz de espalhamento, discutiremos nas próximas seções os resultados numéricos para a transmissividade de *spins* polarizados em dupla barreira assimétrica. Antes, porém, faremos alguns comentários sobre o sistema usado neste trabalho e a apresentação dos resultados até, então, obtidos.

Os resultados que serão discutidos mais adiante, referem-se às heteroestruturas de dupla barreira assimétrica de InAs/GaSb, cujos parâmetros de massa efetiva, *Dresselhaus*

e *Rashba* estão listados na Tab.(5.1). Em todos os casos a energia potencial da barreira vale $V_b = 320$ meV e as dimensões da dupla barreira serão denotadas por $(L_{b1}, L_p$ e $L_{b2})$ que representa as larguras da barreira da esquerda, do poço e da barreira da direita, respectivamente; todas as medidas são dadas em angstroms (\AA).

| | <i>GaSb</i> ^(a) | <i>InAs</i> ^(a) |
|------------------------------------|----------------------------|----------------------------|
| $\alpha_D(\text{meV}\text{\AA}^3)$ | 0.187 | 0.13 |
| $\alpha_R(\text{meV}\text{\AA})$ | 3 | 10.1 |
| m^*/m | 0.041 | 0.023 |

Tabela 5.1: Parâmetros de estrutura de banda de semicondutores

Com o objetivo de permitir uma melhor discussão desses resultados, dividimos a apresentação em seções como segue. Na seção (5.1) discutiremos o efeito do momento paralelo, $k_{\parallel} \neq 0$ no *spin splitting*, nas curvas de transmissão e polarização em dupla barreira assimétrica $(80, 60, 50)$ \AA . Vale salientar que para $k_{\parallel} = 0$ não existe o acoplamento *spin-órbita* de *Rashba* e *Dresselhaus* e os estados da banda de condução *up* e *down* são desacoplados, resultando para o modelo de Hamiltoniano (2×2) dois canais de tunelamento independentes e degenerados. Ao contrário, para situação $k_{\parallel} \neq 0$, os estados da banda de condução *up* e *down* são acoplados, resultando para cada partícula incidente (que denotaremos por *up in* ou *down in*) dois canais de tunelamento, $T_{up\ out}$ e $T_{down\ out}$). Na seção (5.2) discutiremos a transmissividade dependente de *spin* e a polarização para vários valores de ϕ para o sistema com as mesmas dimensões da seção anterior. Na seção (5.3) apresentamos a comparação de resultados da transmissividade e polarização usando os termos de interação *spin-órbita* de Dresselhaus e Rashba associados, com o termo de interação *spin-órbita* de Dresselhaus para um sistema de dupla barreira assimétrica $(80, 60, 50)$ \AA .

5.1 Tunelamento Dependente de *Spin* em Dupla Barreira Assimétrica (80,60,50)

De uma forma simplificada, podemos dizer que a banda de condução de um semicondutor com a inclusão da interação *spin-órbita* é constituída por dois tipos de portadores (elétrons *spin up* e *spin down*). O confinamento dos elétrons na região do poço da dupla barreira assimétrica, veja Fig.5.1 dá origem as subbandas de condução $E_{\uparrow n}(k_{\parallel}, \phi)$ e $E_{\downarrow n}(k_{\parallel}, \phi)$ derivadas da aproximação de massa efetiva, onde n é o índice que classifica os níveis de energia dentro do poço quântico. Para valores de $k_{\parallel} \neq 0$ essas subbandas podem interagir (*spin -mixing*), modificando as massas efetivas dessas partículas, quando comparadas com aquelas observadas no *bulk* (cristal perfeito), sendo um forte indicativo de que a transmissividade deve mudar sensivelmente com o parâmetro k_{\parallel} . Essa interação é formalmente descrita em termos dos elementos proporcionais a k_{\parallel} fora da diagonal do Hamiltoniano de *Dresselhaus* e *Rashba*. Nesta seção, vamos analisar os efeito do *spin mixing* (mistura) no processo de tunelamento de *spins* polarizados em dupla barreira assimétrica de InAs/GaSb com dimensões (80,60,50) Å para $\phi = 30^\circ$ e $k_{\parallel} = 0, 5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}, 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$.

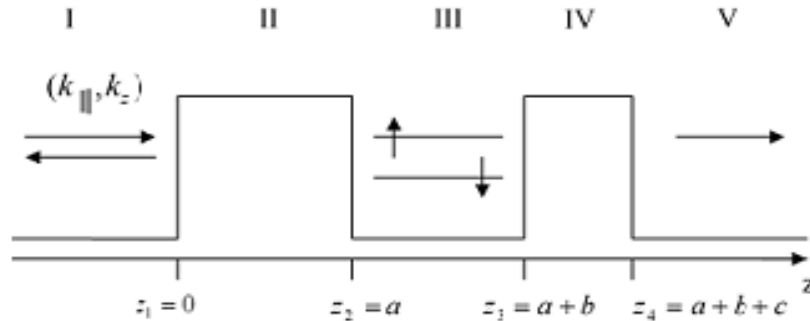


Figura 5.1: Representação esquemática do sistema de dupla barreira assimétrica, mostrando as regiões de interfaces.

5.1.1 Transmissividade de *Spins* Polarizados

Nas Figs.5.2, 5.3 e 5.4 mostramos, respectivamente, para $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $1,0 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, as transmissividades dependentes de *spin* incidente em dupla barreira assimétrica de InAs/GaSb (80,60,50)Å com $\phi = 30^0$ em função da energia incidente, começando da energia crítica E_{C4} ; as partes (a) para *spin up* incidente (*up in*) e as partes (b) para *spin down* incidente (*down in*). Em todos casos, como já comentamos, para cada incidência (*up* ou *down*) temos dois canais de saída *up* e *down* e, os picos nas curvas de transmissão correspondem aos estados ressonantes $E_{\uparrow 1}(up)$ e $E_{\downarrow 1}(down)$ que degenerados em $k_{\parallel} = 0$, se separam quando incluímos a interação *spin-órbita*. O primeiro estado é classificado como *spin up* porque, para a entrada *up in* ele aparece como o estado básico com um pico com intensidade maior para o canal de saída *up out*. Analogamente, o segundo estado é classificado como *spin down* porque para entrada *down in* ele aparece como o segundo pico de maior intensidade para saída *down out*. Podemos ainda observar que a separação de energia dos estados *up* e *down*, também chamada de *spin splitting*, depende fortemente do momento k_{\parallel} . Dessas figuras podemos notar que os *spin splitting* para $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $1,0 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ valem, respectivamente, $\Delta E = |E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1}| = 6,38 \text{ meV}$, $14,7 \text{ meV}$ e $33,9 \text{ meV}$. Quanto maior o valor de k_{\parallel} , maior acoplamento *spin-órbita* e maior *spin-splitting*. Isso é mais evidenciado na Fig. 5.5 onde calculamos a estrutura de bandas (a) e, o *spin splitting* através da matriz de espalhamento (b).

Para a incidência *spin up* (Parte (a) da Fig. 5.2), que equivale a tomar os coeficientes da combinação linear ($a_0^{\uparrow} = 1, a_0^{\downarrow} = 0$) os picos ressonantes $E_{\uparrow 1}(up)$ e $E_{\downarrow 1}(down)$ emergem nas curvas de transmissividade $T_{up \text{ out}}$ e $T_{down \text{ out}}$ para a mesma energia, mostrando que a forte mistura entre eles pode produzir um *spin flip*. Em todos os casos fora da ressonância, as curvas de transmissão, $T_{up \text{ out}}$ (linhas vermelhas) estão sempre acima das curvas de transmissão $T_{down \text{ out}}$ (linhas azuis) e, o pico ressonante $E_{\uparrow 1}(up)$ emerge com uma intensidade maior para saída *up in*. Da mesma forma o pico ressonante $E_{\downarrow 1}$ emerge com maior intensidade para saída *down out*, porém com uma intensidade menor que o

pico $E_{\uparrow 1}(up)$ para saída *up out*; isto é visto mais facilmente a medida que o parâmetro k_{\parallel} aumenta.

Para a incidência *spin down* (Parte (b) da Fig. 5.3), que equivale a tomar os coeficientes da combinação linear ($a_0^{\uparrow} = 0, a_0^{\downarrow} = 1$), o *spin mixing* entre os estados *up* e *down* da banda de condução também aparece como um pico no canal *down out* correspondente ao estado $E_{\uparrow 1}(up)$ e diferentemente da incidência *spin up* as curvas de transmissão nas regiões não ressonantes $T_{down\ out}$ (linhas azuis) estão sempre acima das curvas de transmissão $T_{up\ out}$ (linhas vermelhas) e, o pico ressonante $E_{\downarrow 1}(down)$ emerge com uma intensidade maior para saída *down in*, e o pico ressonante $E_{\uparrow 1}$ emerge com maior intensidade para saída *up out*, porém com uma intensidade menor que o pico $E_{\downarrow 1}(down)$ para saída *down out*. Para finalizar, podemos observar das Figs. 5.2, 5.3 e 5.4, que a medida que o parâmetro k_{\parallel} aumenta as curvas de transmissividade *spin out* e *down out* ficam bem mais próximas.

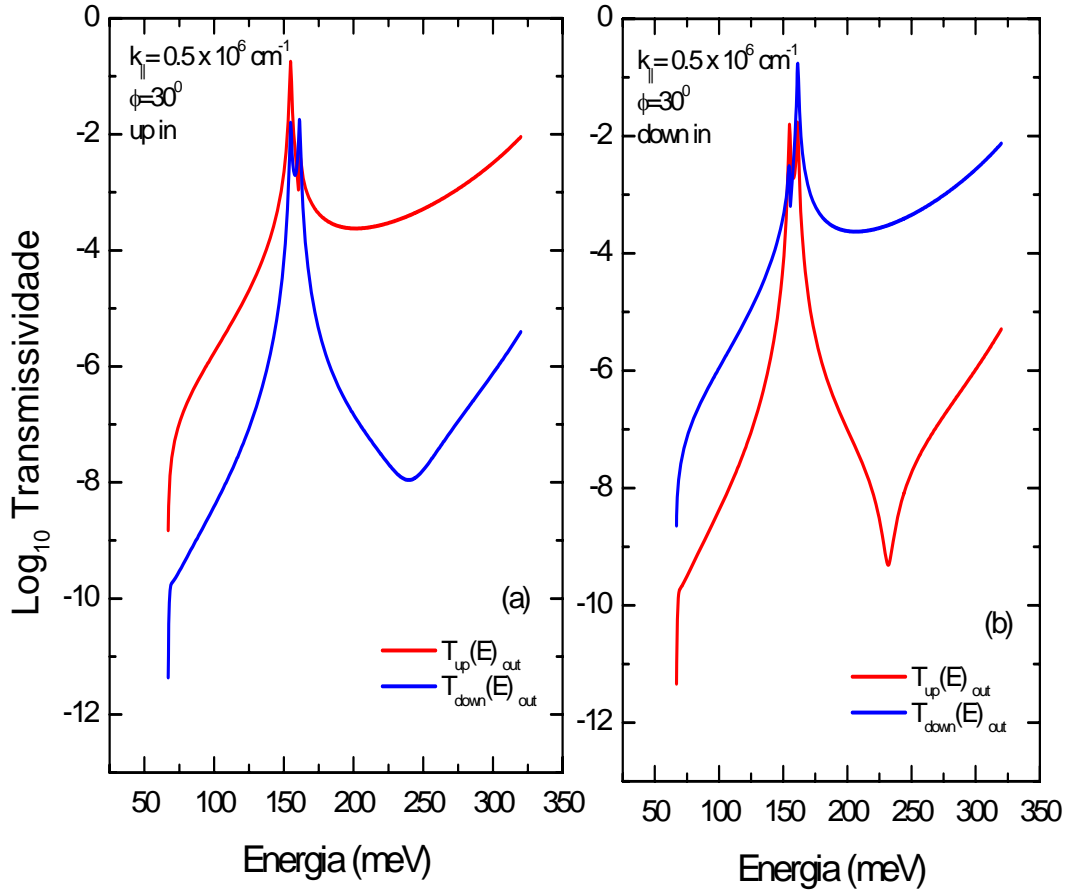


Figura 5.2: Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 30^\circ$ através de heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80,60,50) Å de *InAs/GaSb*, incluindo ambos os termos de interação *spin-órbita* de Rashba e Dresselhaus, para partícula incidente no estado *spin-up* (a) e, (b) partícula incidente no estado *spin-down*. Os demais parâmetros relevantes encontram-se na Tab.(5.1). Os *spins up* e *down* ressonantes estão separados por $\sim 6,38$ (meV).

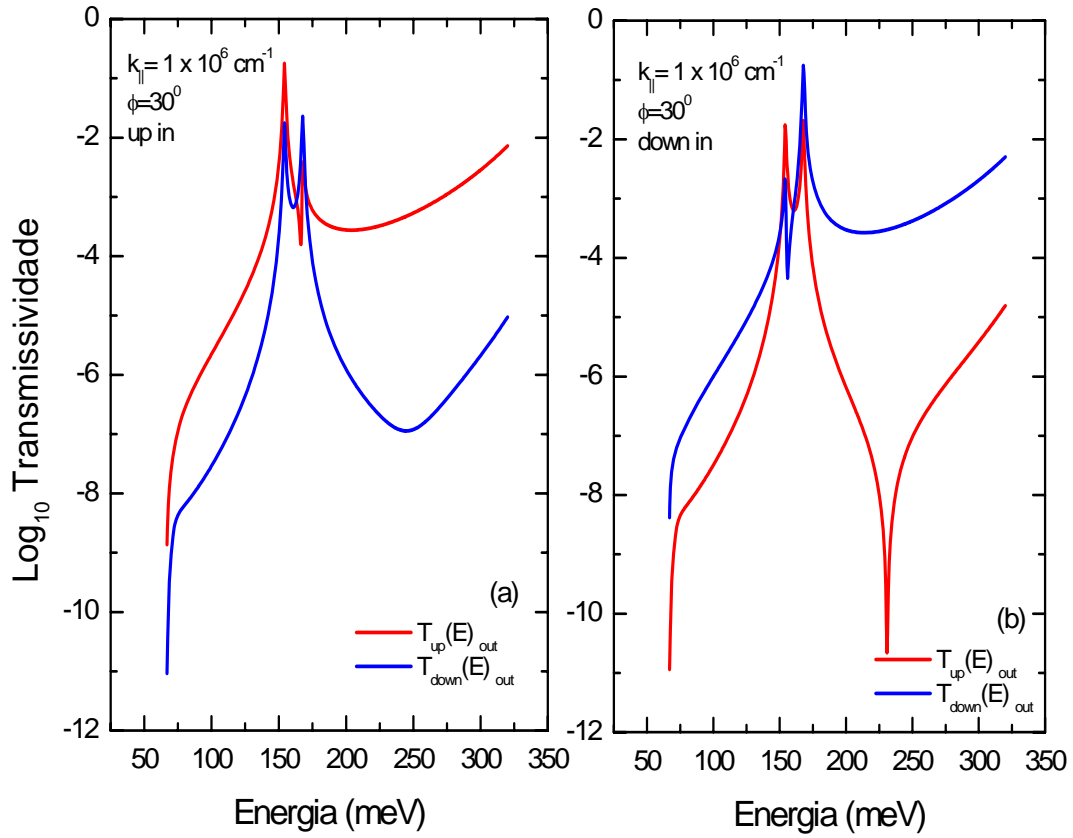


Figura 5.3: Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 30^\circ$ através de heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80,60,50)Å de *InAs/GaSb*, incluindo ambos os termos de interação *spin-órbita* de Rashba e Dresselhaus, para partícula incidente no estado *spin-up* (a) e, (b) partícula incidente no estado *spin-down*. Os demais parâmetros relevantes encontram-se na Tab.(5.1). Os *spins up* e *down* ressonantes estão separados por $\sim 14,70$ (meV).

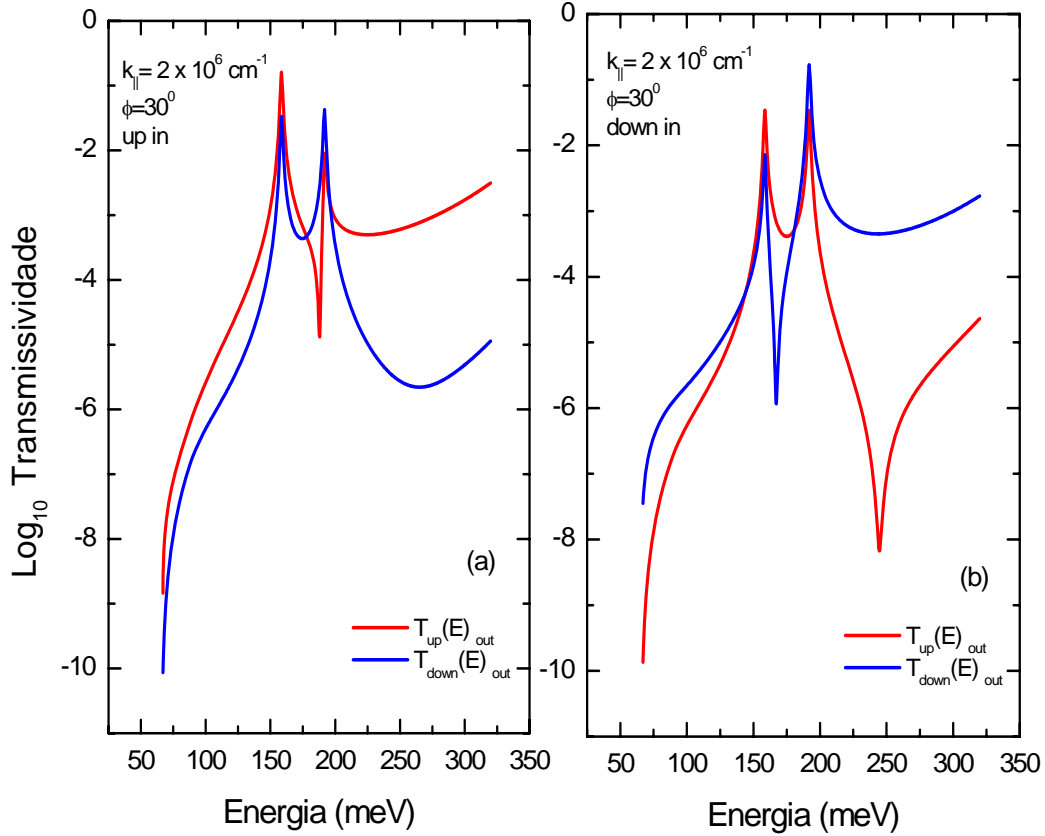


Figura 5.4: Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 30^\circ$ através de heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80,60,50) de $InAs/GaSb$, incluindo ambos os termos de interação *spin-órbita* de Rashba e Dresselhaus, para partícula incidente no estado *spin-up* (a) e, (b) partícula incidente no estado *spin-down*. Os demais parâmetros relevantes encontram-se na Tab.(5.1). Os *spins up* e *down* ressonantes estão separados por $\sim 33,90$ (meV).

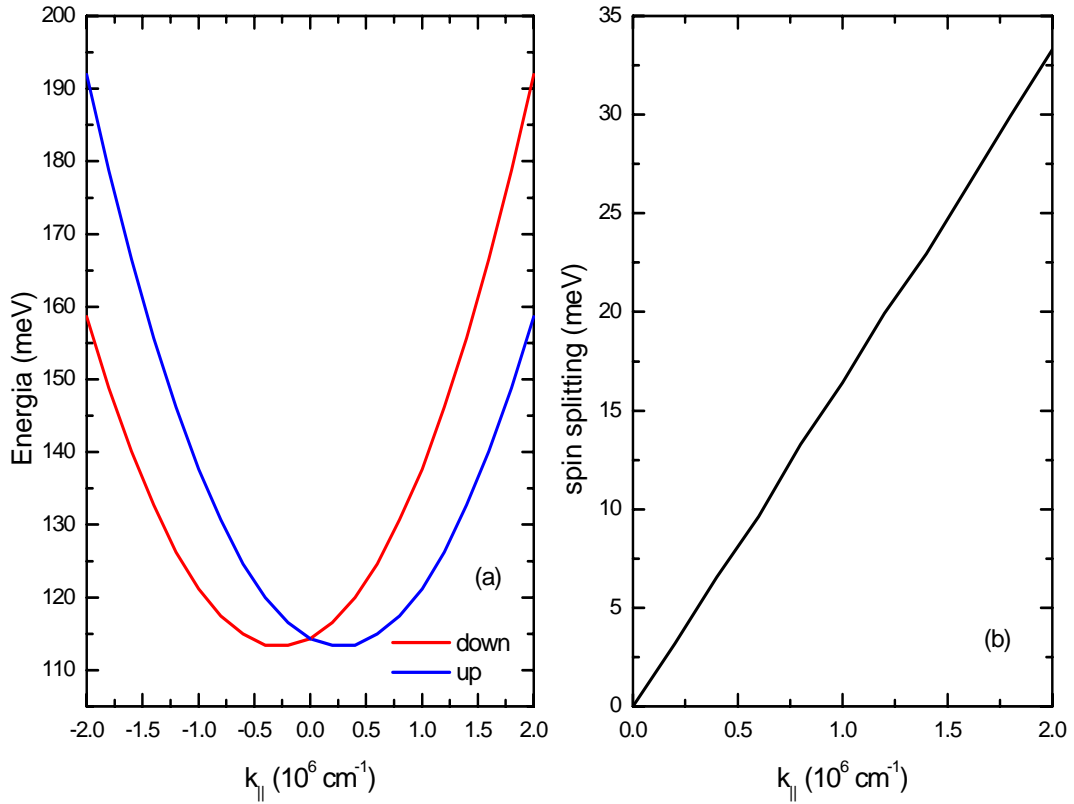


Figura 5.5: (a) mostra a estrutura de bandas para *InAs/GaSb*, ilustrando a quebra de degenerescência dos estados de *spin-up* (linha azul) e *spin-down* (linha vermelha), em função de k_{\parallel} em que $E(k_{\pm}) = E(-k_{\mp})$ devido a simetria de inversão temporal, (b) *spin splitting*.

5.1.2 *Spin* Polarização

Vamos agora discutir o efeito da interação *spin-órbita* na eficiência de polarização (P) dos elétrons de condução em dupla barreira assimétrica de InAs/GaSb (80, 60, 50)Å para $\phi = 30^\circ$ e $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$

As Figs.5.6 (a), (b) e (c) mostram a eficiência de polarização como função da energia para diferentes vetores de onda paralelo as camadas. Devido as variações nas intensidades das curvas de transmissão *up out* e *down out* para as entradas *up in* ou e *down in* a eficiência de polarização depende fortemente da energia incidente e do vetor de onda k_{\parallel} . Em todos os gráficos a energia inicial é a energia crítica E_{c4} , que tem valores, 4,14 meV, 16,6 meV e 66,7 meV para $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, respectivamente. Nesse gráfico podemos observar que a medida em que o momento paralelo k_{\parallel} cresce a eficiência de polarização para a energia inicial (energia crítica E_{c4}) aumenta, atingindo a polarização de quase 100% para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ para elétrons *spin-down*. Isso é devido ao fato de que para os intervalos de energia, $E_{c3} < E < E_{c4}$ o vetor de onda dos elétrons *spin-up* são imaginários e só há partícula *down* incidente na entrada. Para comprovar isso mostramos na Fig. 5.7 a transmisividade em função de ϕ para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $E_0 = 66 \text{ meV}$; o 100% de polarização é atingido sempre que a energia incidente E_0 estiver dentro do intervalo $E_{c3}(k_{\parallel}, \phi) < E_0 < E_{c4}(k_{\parallel}, \phi)$. Podemos ainda observar nas Figs. 5.6 (a), (b) e (c) que a eficiência de polarização atinge nos níveis ressonantes os valores de 80% \rightarrow 82% , 78% \rightarrow 81%, 65% para $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, respectivamente, e a medida que k_{\parallel} paralelo aumenta as curvas de saída *up* e *down* ficam mais próximas, isso é refletido na polarização que é maior para menor valor de k_{\parallel} .

Num futuro cálculo de corrente, é importante conhecer a dependência da transmisividade com o ângulo ϕ . Dessa forma na próxima subseção, discutiremos a transmissão e a *spin* polarização para o outros valores de ϕ .

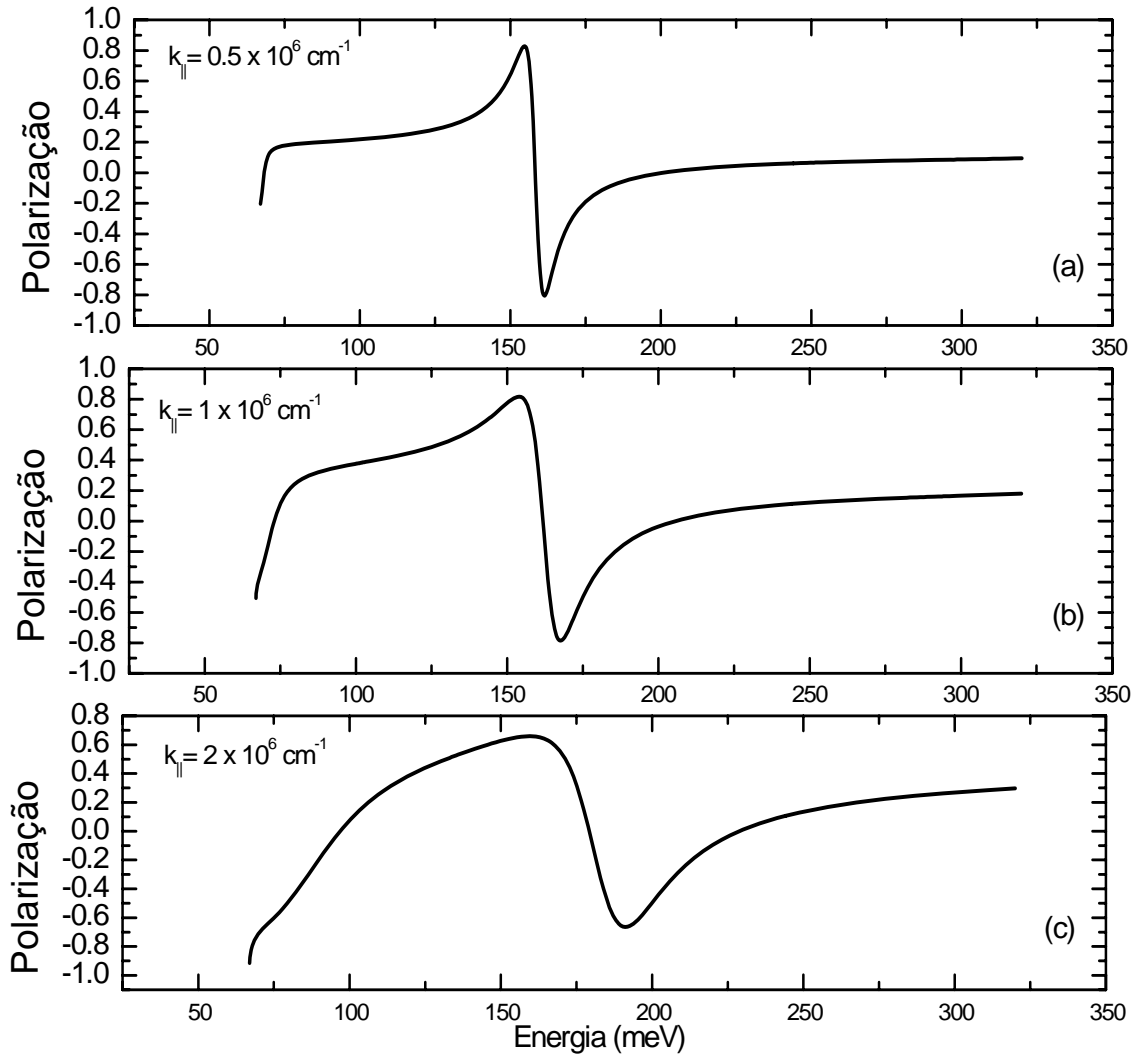


Figura 5.6: Polarização em função da energia do elétron para $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ com $\phi = 30^\circ$ fixo.

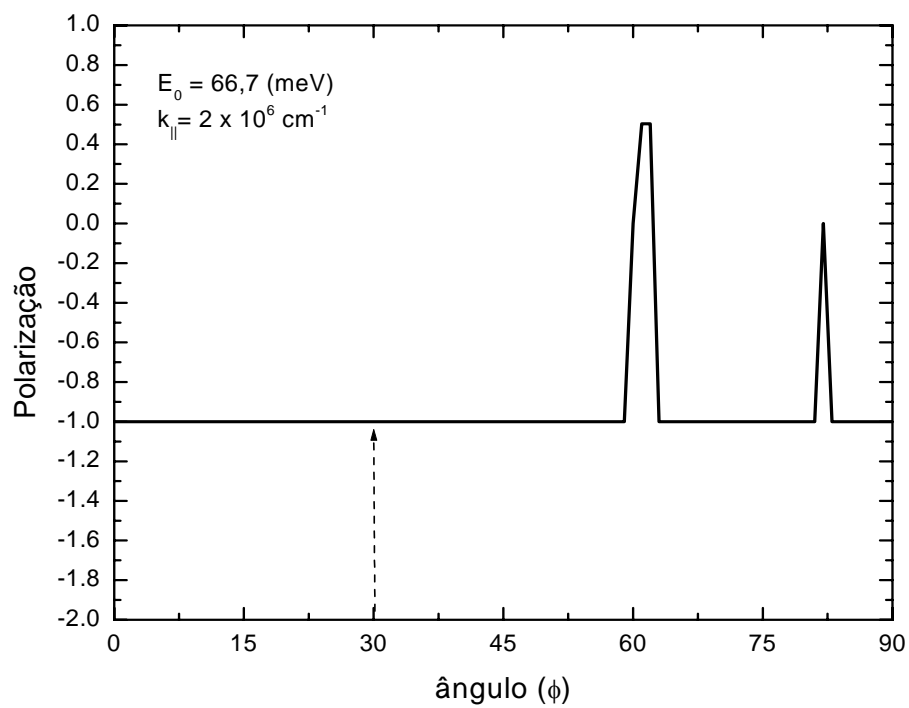


Figura 5.7: Polarização em função do ângulo ϕ com energia inicial $E_0 = 66,7 \text{ meV}$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$.

5.2 Transmissividade e Polarização para Vários Valores de ϕ .

Vamos agora discutir o efeito da interação *spin-órbita* na eficiência de polarização (P) dos elétrons de condução em dupla barreira assimétrica de InAs/GaSb (80, 60, 50)Å para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 75^\circ$, e 90° . Na Fig.5.8, mostramos na parte (a), a transmissividade de *spins* polarizados para incidência *spin up* e saída *spin up* e, na parte (b) a transmissividade para incidência *spin-down* e saída *spin-down*. Nessas figuras, o primeiro pico correspondente ao nível ressonante E_{\uparrow} (*up*) e o segundo ao nível ressonante E_{\downarrow} (*down*). Quando comparamos todas as transmissividades *up out* e *down out*, observamos que as posições dos picos ressonantes variam fracamente com a energia para os vários valores de ϕ e as curvas de transmissividade mudam mais fortemente nas regiões fora da ressonância (entre os dois picos). Um caso interessante é para ângulo $\phi = 45^\circ$ onde nas regiões do emissor e coletor os estados *spin up* e *down* são quase desacoplados (*mixing* é baixo) e temos dois canais de saída independentes, isto é, incidindo *spin-up* na região do emissor, temos apenas saída *up* na região do coletor e incidindo *spin-down* na região do emissor temos apenas saída *spin-down* no coletor. Assim através dessas entradas (*up* ou *down*) podemos classificar as posições dos níveis ressonantes na região do poço; realmente o primeiro pico é *up* e o segundo é *down*. Na Fig.5.9 (a) é mostrado em detalhe o efeito de (*spin-mixing*), em que quanto menor o *mixing* maior a intensidade do pico, é o que acontece para $\phi = 45^\circ$. Na Fig. 5.10 ilustramos o mesmo efeito para o ângulo de $\phi = 135^\circ$, mas neste caso, ocorre uma inversão do estado básico em relação ao ângulo de $\phi = 45^\circ$ (linha preta *up* e vermelha *down*), o primeiro nível ressonante é *down* (linha verde) e o segundo é *up* (linha azul). Isso pode ainda ser confirmado nas curvas de transmissão para os ângulos $\phi = 90^\circ, 105^\circ, 120^\circ, 135^\circ, 150^\circ, 165^\circ, 180^\circ$ mostradas na Fig.5.9 onde a intensidade para entrada *down* [parte (b)] é maior no primeiro pico ressonante e a intensidade para entrada *up* no segundo pico [parte (a)]. Como vimos nas figuras anteriores os ângulos de 45° e 135° para cada canal de

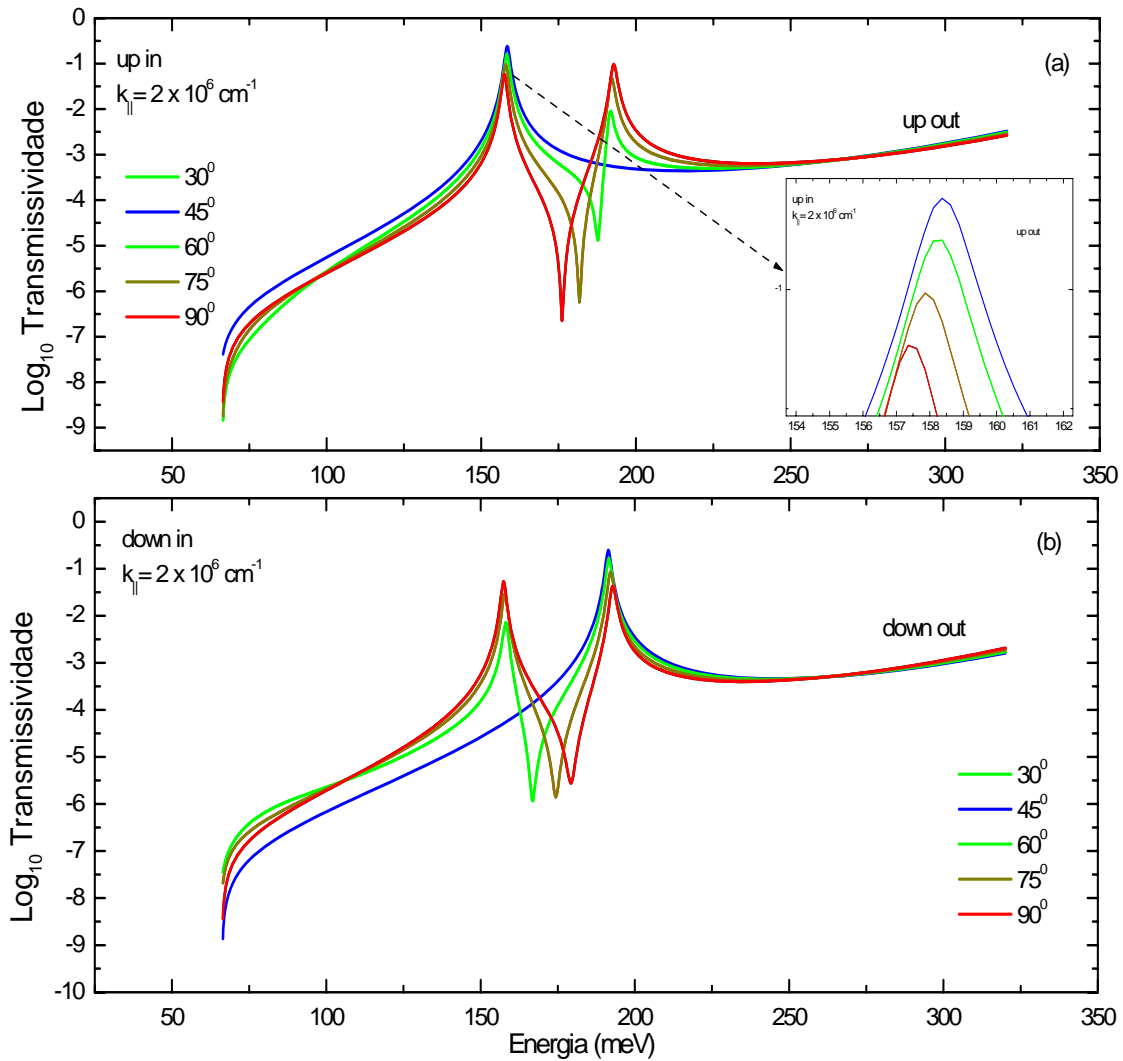


Figura 5.8: Transmissividade de spins polarizados através da heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80,60,50) de $InAs/GaSb$ em função da energia com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo e $\phi = 0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 75^\circ$, e 90° , para incidência de *spin-up* (a) e de *spin-down* (b).

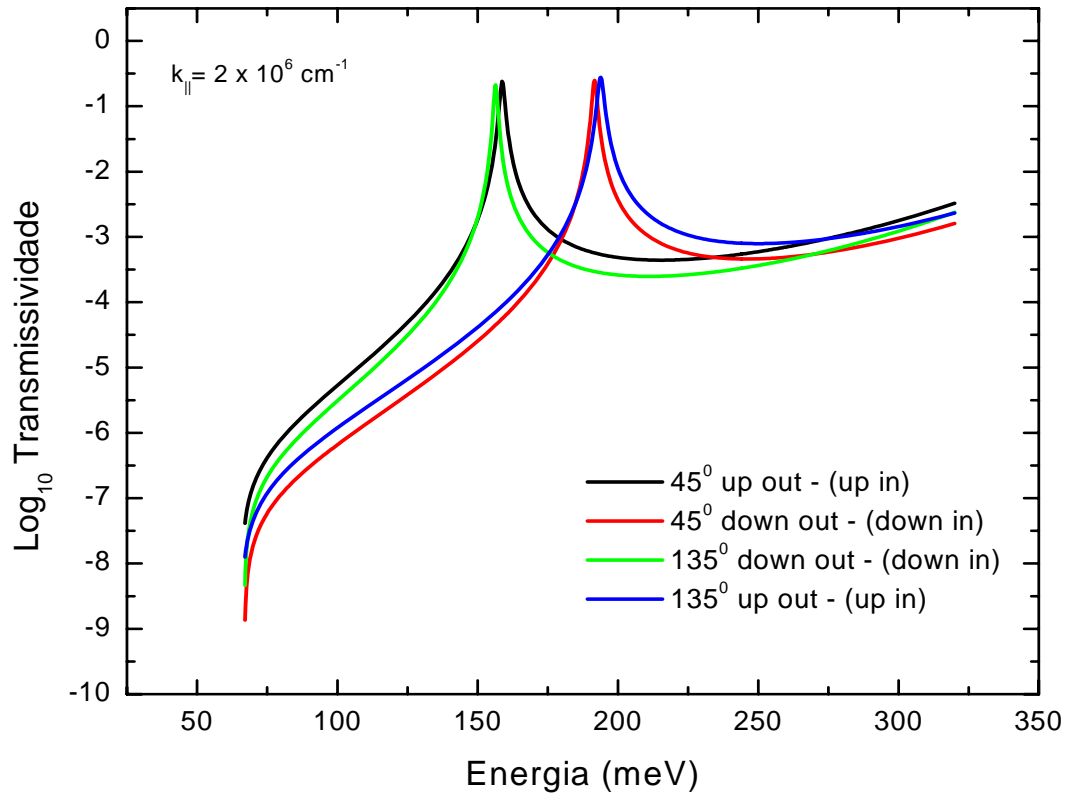


Figura 5.9: Transmissividade de spins polarizados através da heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80, 60, 50) Å de *InAs/GaSb* em função da energia com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo e $\phi = 45^\circ$ e 135° para incidência de *spin-up* e *spin-down*.

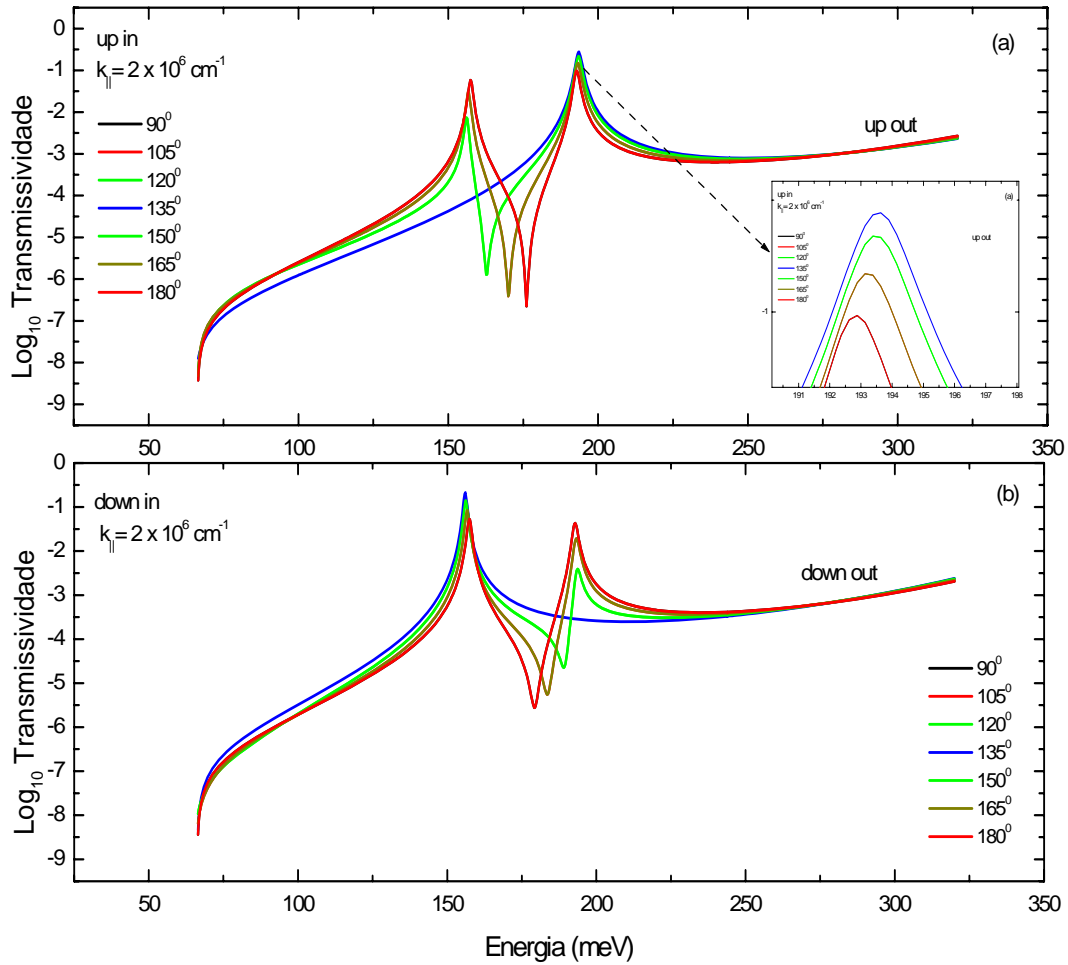


Figura 5.10: Transmissividade de spins polarizados através da heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80, 60, 50) Å de *InAs/GaSb* em função da energia com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo e $\phi = 90^\circ, 105^\circ, 120^\circ, 135^\circ, 150^\circ, 165^\circ$ e 180° , para incidência de *spin-up* (a) e de *spin-down* (b).

entrada *up* ou *down* temos apenas um canal de saída *up* ou *down* dessa forma devemos esperar uma eficiência de polarização bem superior aos demais ângulos no primeiro ou no segundo quadrante. Nas Figs 5.11 (a), (b) e (c) apresentamos a polarização (P) com o momento $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo e $\phi = 30^\circ, 45^\circ$ e 90° . A energia inicial é a energia crítica E_{c4} , que tem valor 66,7 meV. Nesses gráficos podemos observar que a eficiência de polarização atinge nos níveis ressonantes os valores de 67% ,100%,e 10% \longrightarrow 20% para os ângulos $\phi = 30^\circ, \phi = 45^\circ$ e $\phi = 90^\circ$, repectivamente. Na Fig.5.12, temos a polarização (P) com $\phi = 135^\circ$ e momento $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e a energia inicial E_{c4} , tem valor 66,7 meV. Neste caso, ocorre uma inversão do estado básico em relação ao ângulo de $\phi = 45^\circ$, como já discutido anteriormente, e a eficiência de polarização também atinge quase 100%.

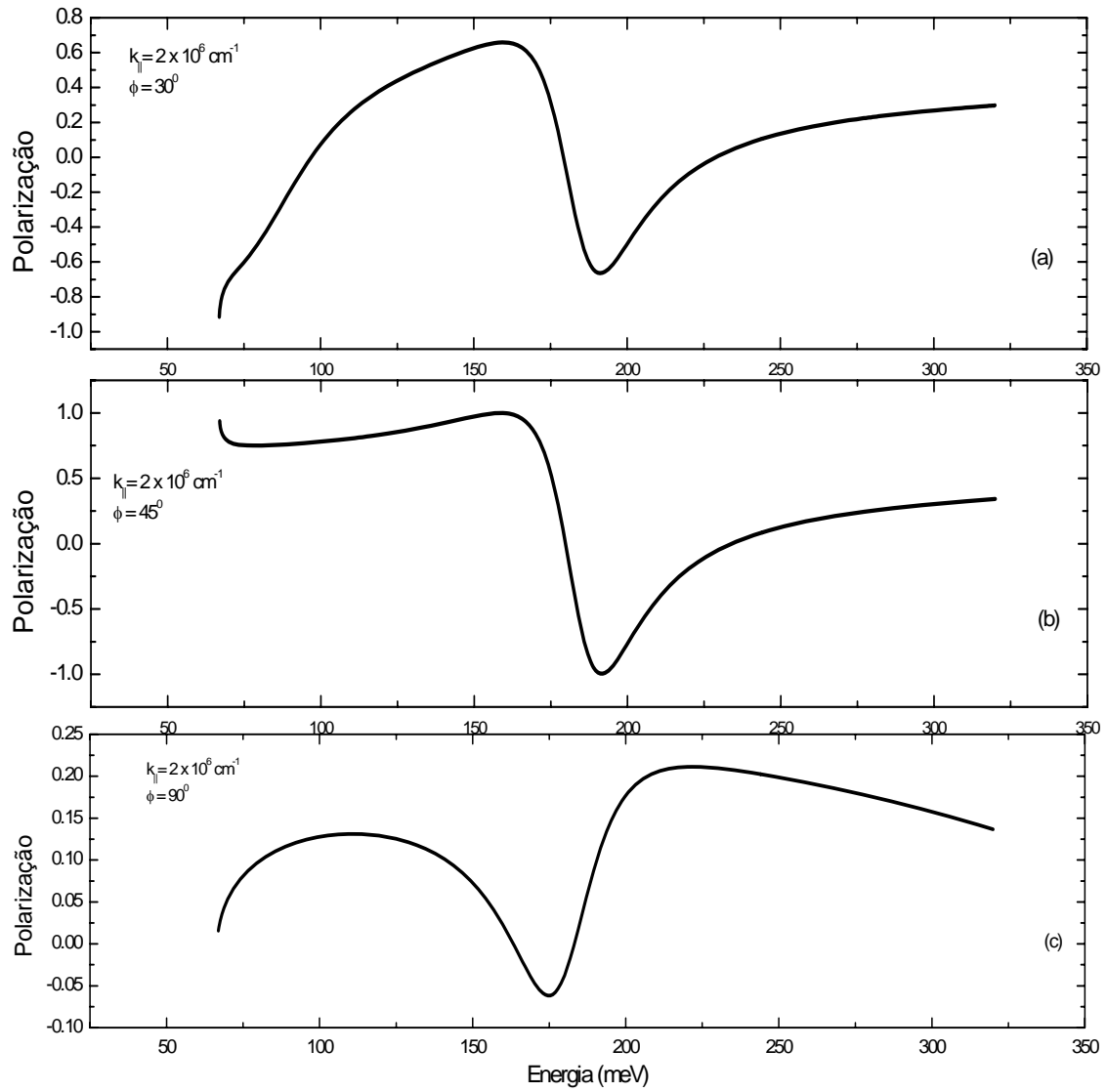


Figura 5.11: Polarização em função da energia do elétron para vários valores de ϕ com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo.

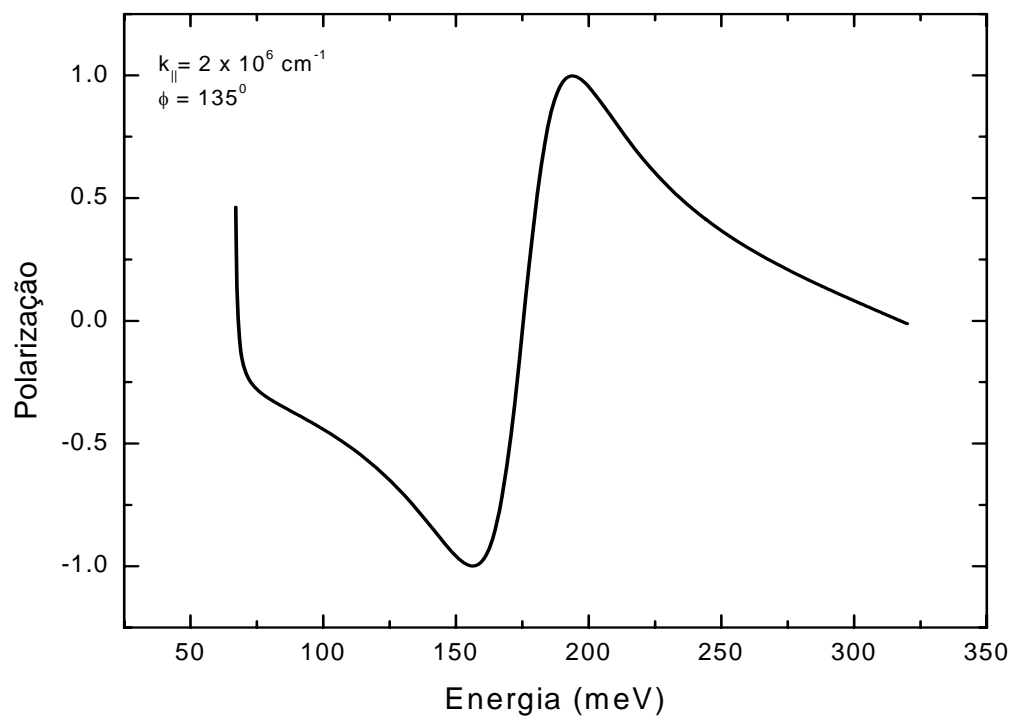


Figura 5.12: Polarização em função da energia do elétron com $\phi = 135^\circ$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$.

5.3 Comparação da Transmissividade e Polarização Dresselhaus x Dresselhaus + Rashba

Para finalizar, nessa seção comparamos a transmissividade incluindo somente os termos com a completa interação *spin-órbita* (Dresselhaus + Rashba) para barreira assimétrica (InAs / GaSb / InAs / GaSb / InAs) com $L_{b_1} = 80\text{Å}$, $L_p = 60\text{Å}$, e $L_{b_2} = 50\text{Å}$; $\phi = 45^\circ$ e a altura do potencial da barreira $V_b = 320\text{ meV}$.

Nas Figs.5.13 (a) e (b) mostramos a transmissividade e a polarização somente com os termos de Dresselhaus incluídos no Hamiltoniano. O primeiro estado ressonante (linha vermelha) é *down* e o segundo estado é *up*. Para baixas energias entre 67 e 70 meV a *spin* polarização é *up* (positiva) variando de 90% \rightarrow 40% e, para pontos próximos ao primeiro nível ressonante a transmissividade *down* (linha vermelha) é maior que a *down* (linha preta) e a *spin* polarização *down* prevalece atingindo um valor de 72%; o inverso acontece no segundo nível ressonante (*up*) a *spin* polarização prevalece atingido um valor máximo de 83,5%. Na Fig.5.14, mostramos a transmissividade e *spin* polarização quando ambos os efeitos de Rashba e Dresselhaus são incluídos. O primeiro estado ressonante é *up* (linha preta) e o segundo estado é *down* (linha vermelha). Para esse caso podemos observar que a inclusão dos termos de Rashba e Dresselhaus provoca um aumento da *spin* polarização que atinge um valor de 100% nos estados ressonantes.

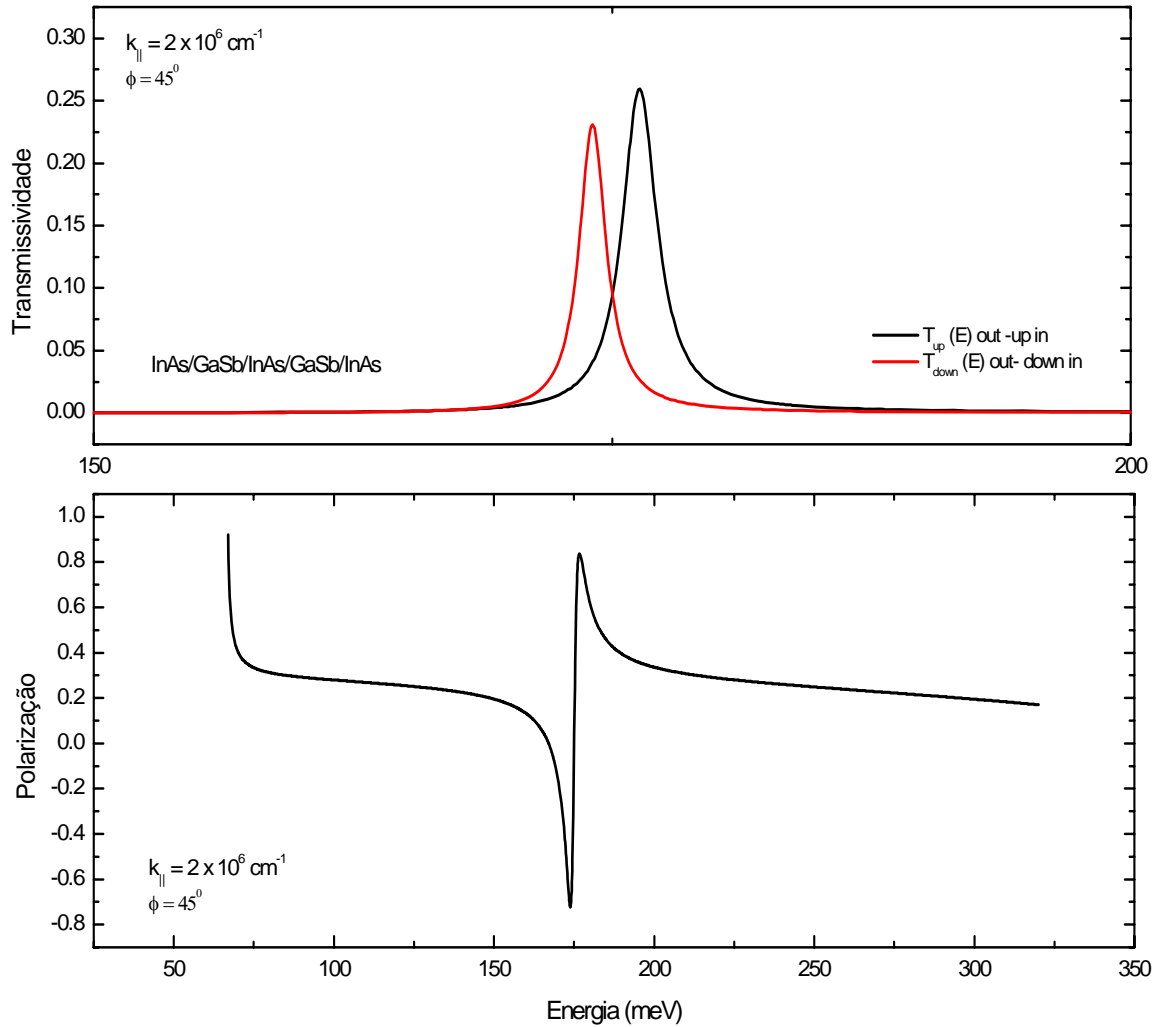


Figura 5.13: Transmissividade de spins polarizados (a) através da heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80, 60, 50)Å de *InAs/GaSb* em função da energia com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 45^\circ$ para incidência de *spin-up* e de *spin-down* com os termos de interação *spin-órbita* de Dresselhaus, (b) Polarização (P) em função da energia do elétron.

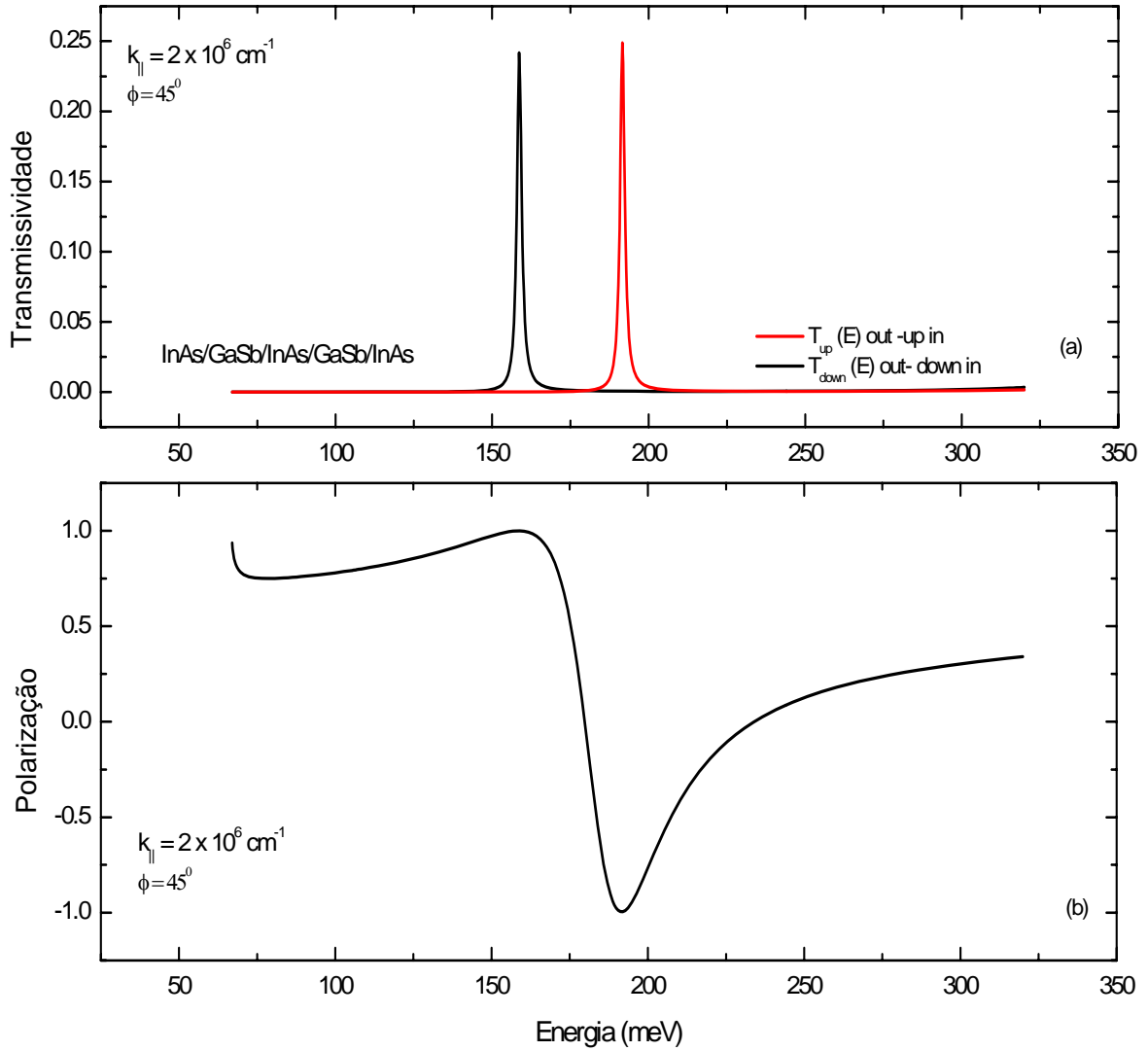


Figura 5.14: Transmissividade de spins polarizados (a) através da heteroestrutura de dupla barreira assimétrica (80, 60, 50)Å de *InAs/GaSb* em função da energia com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\phi = 45^\circ$ para incidência de *spin-up* e de *spin-down* com ambos os termos de interação *spin-órbita* de Dresselhaus e Rashba, (b) Polarização (P) em função da energia do elétron.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho apresentamos a transmissividade de elétrons polarizados em heteroestruturas semicondutoras usando a técnica da matriz de espalhamento na aproximação da massa efetiva do modelo de Rashba-Dresselhaus.

O problema do tunelamento de *spins* polarizados em dupla barreira assimétrica foi tratado, teoricamente, na aproximação de massa efetiva por *K. Gnanasekar e K. Navaneethakrishnan* [17] usando o modelo que inclui o combinado efeito de interação *spin-órbita Dresselhaus* linear e *Rashba*. No modelo proposto o tunelamento dependente de *spin* através da dupla barreira é descrito diagonalizando o Hamiltoniano *Dresselhaus-Rashba* para $\phi = \pi/4$ que permite desacoplar os estados de *spin* com orientações *up* (+) e *down* (-). Usando esse modelo os autores encontram uma eficiência de polarização entre 75–85%

Motivados pela versatilidade da técnica da matriz de espalhamento, que permite a incorporação de diferentes tipos interação, nos propusemos neste trabalho estudar os efeitos de interação *spin-órbita* na transmissividade de elétrons em sistemas de dupla barreira assimétrica de *InAs/GaSb* usando um modelo de interação *spin-órbita* contendo duas contribuições; o termo de Dresselhaus (BIA) até a terceira ordem no momento paralelo as camadas, e a interação *spin-órbita* de Rashba devido assimetria de inversão espacial na heteroestrutura (SIA).

No cálculo da transmissividade é fundamental conhecermos o movimento das partículas no cristal perfeito, através das funções envelopes $\mathbf{F}_\uparrow(k_\parallel, k_{z\uparrow}, \phi)$, $\mathbf{F}_\downarrow(k_\parallel, k_{z\downarrow}, \phi)$ e da energia $E^\pm(k_\parallel, k_{z\downarrow}, \phi)$ para os estados *spin-up* e *spin-down*. Isto foi feito no Capítulo 4, usando o formalismo da aproximação de massa efetiva, que apresentamos no Capítulo 3.

No esquema da técnica da matriz de espalhamento, as componentes do vetor de onda k_z , é uma quantidade muito importante para a construção da função de onda total em cada região da heteroestrutura, que como vimos, é obtida da combinação linear das soluções no *bulk*. Para isso no Capítulo 4 desenvolvemos uma análise bem elaborada desses vetores, com vistas à formação das funções envelopes na heteroestrutura. Como resultado geral dessa análise, observa-se que a natureza das soluções de k_z para os estados de *spin-up* e *spin-down* dependem da magnitude das quantidades k_x , k_y e da energia E . Como vimos naquele capítulo, existem duas energias críticas E_{c3} , e E_{c4} que dividem o espectro de energia em duas regiões, das quais dependem a natureza de k_z .

Uma vez obtida as funções envelopes no cristal perfeito, usamos a combinação linear dessas funções e as condições de contorno apropriadas em cada interface, que correspondem à conservação da densidade de probabilidade e da densidade de corrente de probabilidade para a obtenção da matriz de espalhamento,. isto é feito no Capítulo 4, para o modelo de uma banda. Vale lembrar que nesses cálculos usamos a aproximação já tradicional na teoria de massa efetiva de que as funções de Bloch são iguais nos dois materiais que formam a interface. Desta maneira, calcula-se a transmissividade como a razão entre as correntes de probabilidade na região do coletor e do emissor. A expressão analítica para tais correntes, dentro da aproximação de massa efetiva foi introduzida formalmente no Capítulo 4. No Capítulo 5, discutimos os resultados para a transmissividade em heteroestrutura de dupla barreiras assimétrica do tipo *InAs/GaSb* (80, 60, 50), com os seguintes parâmetros: $k_\parallel = 0, 5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_\parallel = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $k_\parallel = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$.

Para o sistema considerado temos apenas um nível na região do poço que se quebra em dois devido a interação *spin* órbita. Com excessão das direções ($\pm 45^\circ$ $n = 1, 3, 5, 7$) para cada incidência (*up* ou *down*) na região do emissor, temos dois canais de saída *up* ou

down e, os picos nas curvas de transmissividades correspondem aos estados ressonantes $E_{\uparrow 1}$ (*up*) e $E_{\downarrow 1}$ (*down*) que são separados quando incluímos a interação *spin-órbita*. Assim a transmissividade de saída *spin up* e *down* tem ressonância nos dois estados ressonantes e pico do estado *up* tem intensidade maior para incidência *up* e o pico do estado *down* tem intensidade maior para incidência *down*. As curvas de transmissividades *up out* estão acima das curvas de transmissividade *down out* para incidência *up* e as transmissividades *down*. O ordenamento desses estados muda e, depende do quadrante que está o ângulo ϕ ; assim para o ângulo de 30° o primeiro estado ressonante é *up* e o segundo é *down*. Para as direções ($\pm 45^\circ$ $n = 1, 3, 5, 7$), a mistura entre as bandas de condução *up* e *down* é baixa e temos dois canais de saída praticamente independentes; dessa forma para incidência *spin up* só temos transmissividade *up* e incidência *down* só temos transmissividade *down* com ressonância nos seus respectivos estados ressonantes.

Fixando o ângulo de 30° observamos nas curvas de transmissividade uma separação maior dos níveis ressonantes a medida que o momento paralelo aumenta. Essa separação varia linearmente com k_{\parallel} uma contribuição que vem dos termos lineares de Dresselhaus e Rashba. Observamos ainda para esse ângulo que a eficiência de polarização atinge nos níveis ressonantes os valores de $80\% \rightarrow 82\%$, $78\% \rightarrow 81\%$, 65% para $k_{\parallel} = 0, 5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, respectivamente, e a medida que k_{\parallel} paralelo aumenta as curvas de transmissividade de saída *up* e *down* ficam mais próximas, isso é refletido na polarização que é maior para menor valor de k_{\parallel} . Entretanto a medida em que o momento paralelo k_{\parallel} cresce, a eficiência de Polarização para as energias inicial no intervalo $E_{c3} < E < E_{c4}$ atinge 100% . Desse modo, através do parâmetro k_{\parallel} podemos controlar a eficiência de polarização.

Fixando o parâmetro $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e variando $\phi = 0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 75^\circ$, e 90° (primeiro quadrante), e $\phi = 90^\circ, 105^\circ, 120^\circ, 135^\circ, 150^\circ, 165^\circ, 180^\circ$ (segundo quadrante) observamos que as posições dos picos ressonantes variam fracamente com a energia para os vários valores de ϕ e as curvas de transmissão mudam mais fortemente nas regiões fora da ressonância. As direções $\phi = 45^\circ$ e 135° são mais interessante; nessa situação como é

baixa a mistura no emissor e coletor (elementos fora da diagonal do Hamiltoniano) desse modo, podemos identificar mais facilmente os níveis ressonantes *up* e *down* e a eficiência de polarização atinge valores de 100%, o que sugere que heteroestruturas assimétricas de InAs/GaSb podem ser usadas para construção de *filtros de spins*; já para $\phi = 90^\circ$ a polarização varia entre 10% e 20%. Assim através do parâmetro ϕ também podemos controlar a *spin* polarização.

Diferentemente de [17], o modelo combinado Dresselhaus-Rashba usado nessa dissertação apesar de mais complexo, permite um controle maior nas propriedades eletrônicas através do momento paralelo as camadas, e do ângulo polar ϕ . Portanto, interações *spin-órbita* de Dresselhaus e Rashba associadas são mecanismos importantes para aumentar a eficiência de dispositivos *spintrônicos*.

Para finalizar, entendemos que todos esses efeitos seriam melhor investigados com a determinação da corrente de tunelamento, uma vez que esta quantidade serviria de objeto de comparação com resultados experimentais. Porém, devido ao grande esforço computacional envolvido nesse cálculo, reservamos tal proposta para trabalhos futuros, bem como a de aplicar estas técnicas à situações mais complicadas, como para materiais semi-magnéticos, ressonância em poços duplos, etc.

Referências

- [1] I. Malajovich *et al.*, "Persistent sourcing of coherent *spins* for multifunctional semiconductor *spintronics* ", Nature (London) **411**, 770 (2001).
- [2] M.L. Roukes, "Electronics in a *spin* ", Nature (London) **411**, 747 (2001). Este artigo ("News and Views ") discute o impacto da Ref.[1]
- [3] V. P. Labella *et al.*, "Spatially resolved *spin*-injection probability for gallium arsenide ", Science **292**, 1518 (2001). Veja comentário deste artigo na *Physics Web*, "*spintronics* turns a corner " (maio/2001).
- [4] J. A. Gupta *et al.*, "Ultrafast manipulation of electron *spin* coherence ", Science **292**, 2458 (2001).
- [5] R. F. Service, "Lighting the way to a quantum computer ", Science **292**, 2412 (2001). Este artigo comenta a relevância da Ref [4].
- [6] E.A. de Andrada e Silva , G. C. La Rocca, F. Bassani , Phys. Rev. **B** 50 (1994) 8523.
- [7] E.A. de Andrada e Silva , G. C. La Rocca, F. Bassani , Phys. Rev. **B** 55 (1997) 16293.
- [8] S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [9] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, "Lateral drag of *spin* coherence in gallium arsenide", Nature (London) **397**, 139 (1999).

- [10] R. Fiederling *et al.* "Injection and detection of a *spin*-polarized current in a light-emitting diode ", Nature (London) **402**, 787 (1999).
- [11] Y. Ohno *et al.* "Electrical *spin* injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure", Nature (London) **402**, 790 (1999).
- [12] M. Cahay, M. McLennan, S. Datta. Phys. Rev. B **17**, 10125 (1988).
- [13] A. Voskoboynikov, S.S. Liu, C.P. Lee, Phys. Rev. **B 59** (1999) 12514.
- [14] E.A. de Andrada e Silva , G. C. La Rocca, Phys. Rev. **B 59** (1999) 15583.
- [15] A. Voskoboynikov, S.S. Liu, C.P. Lee, O. Tretyak, j. Appl. Phys. **87** (2000) 387.
- [16] V.I. Perel', S. A. Tarasenko, I.N. Yassievich, S.D. Ganichev, V.V. Bel 'kov, W. Prettl, Phys. Rev. **B 67** (2003) 201304.
- [17] K. Gnanasekar and K. Navaneethakrishnan, Physica E **28** (2005) 328-332.
- [18] J. M. Ziman, *Principles of Theory of Solids* (Cambridge University Press, London, (1972) p. 173
- [19] J. F. Walker, "Semiconductor Growth Techniques ", J. R. Leite, A. Fazzio, A. S. Chaves, editores, Proceedings of the 5th Brazilian School on Semiconductor Physics, página 22, Singapore, (1992), World Scientific.
- [20] S. R. White, L. J. Sham, Phys. Rev. Lett, **47**, 879-882, (1981).
- [21] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics1* (Holt, Rinehart and Winston, 1976) p. 176; Methods of Band Calculations Applicable to III-V Compounds. R. K. Williardson e A.C. Beer, editores, Physics of III-V Compounds, vol.1 de *Semiconductors and Semimetals*. páginas 21-24, New York, (1966). Academic Press.
- [22] B. K. Ridley. Quantum Processes in Semiconductors. Clarendon Press, Oxford, (1982).
- [23] J. Bardeen, J. Phys. Chem. Solids, **6**, 367-371, (1938).

- [24] F. Seitz. The Modern Theory Solids, capítulo **10**, página 352. McGraw Hill, New York, (1940).
- [25] E. O. Kane, *Semiconductors and Semimetals*, R. K. Williarddson, A.C. Beer, eds. (Academic Press, New York, 1966) vol. **1** p.75.
- [26] P. Löwdin, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951).
- [27] Cohen, A.M. Cálculo da Estrutura Eletrônica e Absorção Óptica em Poços Quânticos Semicondutores Tese de Doutorado apresentada ao Instituto de Física e Química da Universidade Federal de São Carlos. 1990.
- [28] M. H. Weiler, "*Semiconductors and Semimetals*", R. K. Williarddson and A.C. Beer, eds. (Academic Press, New York, 1981) vol.**16**, p.119.
- [29] Chun-Nan Chen, Wei-Long Su, Kuo-Ching Chang, Sheng-Hsiung Chang, Jih-Chen Chiang, Ikai Lo, Wan-Tsang Wang, Hsiu-Fen Kao, and Meng-En Lee, Journal of Applied Physics **104**, 024901 (2008).
- [30] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi and T. Enoki, Phys. Rev. Lett. **78** (7), 1335-1338 (1997) G. Y. Wu, K.-M. Hung, and C.-J. Chen, Phys. Rev. B **46**, 1521 (1992).
- [31] S. J. Papadakis, E. P. de Poortere, H. C. Manoharan, M. Shayegan, R. winkler: Science **283**, 2056 (1999).
- [32] Y.A. Bichkov, E. I. Rashba, J. Phys.C: Solid State Phys. **17**, 6039-6045 (1984).
- [33] Y.A. Bichkov, E. I. Rashba, JETP Lett **39** (2), 78-81 (1984).
- [34] G. Lommer, F. Malcher, U. Rössler, B. E. Kane, Phys. Rev. B **32**, 6965 (1985).
- [35] .U.Rössler, F. Malcher, G. Lommer: "*spin splitting in structured semiconductors*" in *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II* ed. by G. Landwehr (Springer, Berlin, Heidelberg, 1989), vol, **87** of Solid State Sciences, p.376.

- [36] R. Wollrab *et al.*, Semicond. Sci. Technol. **4** , 491 (1989).
- [37] J. Luo *et al.*, Phys. Rev. B **41**, 7685 (1990).
- [38] J. Nitta *et al.*, Phys. Rev. Lett.**78**, 1335 (1997).
- [39] J. P. Heida *et al.*,Phys. Rev. B **57**, 11911 (1998).
- [40] A C. Bittencourt, A. M. Cohen, G. E. Marques, Phys. Rev. B **57**, 4525 (1998).
- [41] Bittencourt, A.C.R. Tunelamento Ressonante de Buracos em Heteroestruturas Semicondutoras com Camadas Tensionadas. Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal de São Carlos. 1996.
- [42] P. W. Anderson, Phys. Rev. B **23**, 4828 (1981).
- [43] A. M. Cohen and G. E. Marques, Phys. Rev **B 41**, 10608 (1990).
- [44] Y. C. Chang and J. N. Schulman, Phys. Rev. **B 31**, 2056 (1985).