

Universidade Federal do Amazonas
Instituto de Ciências Exatas - ICE
Departamento de Física - DF
Programa de Pós-Graduação em Física

Transmissividade de Spins Polarizados em Dupla Barreira Simétrica

Efraim Fernandes Marques

Dissertação de Mestrado

Manaus, Outubro de 2012

Universidade Federal do Amazonas
Instituto de Ciências Exatas - ICE
Departamento de Física - DF
Programa de Pós-Graduação em Física

Transmissividade de Spins Polarizados em Dupla Barreira Simétrica

Efraim Fernandes Marques

Orientador:

Prof. Dr. Hidembergue Ordozgoith da
Frota - UFAM

Dissertação submetida por Efraim Fernandes Marques como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física pelo Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal do Amazonas.

Manaus, Outubro de 2012

Agradecimentos

Agradeço a DEUS, o CRIADOR e MANTENEDOR da vida;

À minha amada esposa, Cristiane de Lima Maques, palavras não podem expressar o agradecimento pelo seu apoio e amor incondicional;

Aos meus pais por me ensinarem o caminho dos estudos;

Ao prof. Dr. Antonio Carlos Rodrigues Bittencourt, pelo apoio como, ora orientador, ora como coorientador, que me ajudou a desenvolver esse trabalho;

Ao prof. Dr. Hidembergue Ordozgoith da Frota, por me aceitar como seu orientando;

Aos meus amigos e colegas de mestrado e trabalho, que me ajudaram com muitas discussões de ensino-aprendizagem;

Ao meu colega de trabalho Dr. Elton M. Santos, que me ajudou muito neste trabalho;

Aos professores da PPg Física Ufam, pelo conhecimento e ajuda;

A todos que contribuíram direta e indiretamente pela realização deste trabalho.

Resumo

Neste trabalho, a técnica da matriz de espalhamento é usada para calcular a transmissividade de spins polarizados através de heteroestruturas semicondutoras de dupla barreira simétrica. O movimento de elétrons de condução são descritos na aproximação da massa efetiva do modelo completo de Dresselhaus.

A transmissividade e a polarização são calculadas como função da energia do elétron para $k_{\parallel} = 0, 5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ com vários valores de ϕ , para um sistema $\text{GaSb}/\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}/\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{Sb}/\text{GaSb}$. Fixando o momento paralelo k_{\parallel} e variando $\phi = 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ 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 $54\% \rightarrow 82\%$ nos níveis ressonantes. Para a direção $\phi = 45^\circ$, o *spin-mixing* produz uma eficiência de polarização de quase 100% . Ao aplicarmos uma tensão externa, os picos de transmissividade e spin polarização sofrem um deslocamento para regiões de energias mais baixas.

Abstract

In this dissertation, the scattering matrix technique is used to calculate the transmissivity of polarized spins through semiconductors heterostructures of symmetrical double barrier. The movement of electrons is described in the effective mass approach of the complete Dresselhaus models.

The transmissivity and polarization are calculated as a function of electron energy with $k_{||} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{||} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ and $k_{||} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ varying the angle ϕ *GaSb/Ga_xAl_{1-x}Sb/GaSb/Ga_xAl_{1-x}Sb/GaSb* system. Fixing the parallel moment $k_{||}$ and varying $\phi = 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ 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 54% \rightarrow 82% in the resonant levels. For the direction $\phi = 45^\circ$, the spin mixing produces a spin polarization efficiency of nearly 100 %. Applying an external voltage, the peak transmissivity and spin polarization undergo a shift towards regions to lower energies.

Índice

Resumo	iv
Abstract	v
1 Introdução	1
2 Aproximação da Massa Efetiva	5
2.1 Modelo de Uma Banda	6
2.2 Modelo para Multibandas	10
2.3 Aproximação da Massa Efetiva em Heteroestruturas	11
3 Modelo de Dresselhaus	15
3.1 Método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$	16
3.1.1 Representação $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ sem Acoplamento Spin-Órbita	16
3.1.2 Representação $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ com Interação Spin-Órbita	19
3.2 Aproximação de Kane	21
3.3 Hamiltoniano de Dresselhaus e o Hamiltoniano Total	26
4 Transmissividade Dependente do Spin	28
4.1 Solução da Equação de Massa Efetiva	28
4.1.1 Natureza das Soluções de k_z	31
4.2 Formalismo da Matriz Espalhamento	32
4.3 Cálculo dos Coeficientes de Transmissão e da Eficiência de Polarização	36

5	Resultados da Transmissividade e Spin Polarização	38
5.1	Tunelamento Dependente de Spin em Dupla Barreira Simétrica (50,30,50) .	40
5.1.1	Transmissividade de Spins Polarizados sem Campo	40
5.1.2	Polarização de Spin	41
5.1.3	Polarização de Spin para outros Valores de ϕ	45
5.2	Transmissividade de Spins Polarizados com Campo	48
6	Conclusões	52

Lista de Figuras

1.1	Átomos ao longo da direção [111] de um diamante (acima) e uma estrutura zinc blende (abaixo). Os diferentes tipos de átomos (indicados por cores) impedem a simetria de inversão na estrutura zinc blende.	3
2.1	Ilustração de uma heteroestrutura do tipo poço quântico onde mostra a disposição das camadas dos materiais (A) e (B).	12
3.1	Representação esquemática da estrutura de banda dos componentes 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.	21
4.1	Heteroestrutura com N camadas. A figura mostra os coeficientes das ondas incidentes e das ondas refletidas ou espalhadas em cada região.	29
4.2	Energias críticas E_{c3} e E_{c4} em função do parâmetro $k_{ }$, com $\phi = 30^\circ$	32
5.1	Representação esquemática do sistema de dupla barreira simétrica.	39
5.2	Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{ } = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Partícula incidente <i>spin up</i> em (a) e <i>spin down</i> em (b). O <i>spin - splitting</i> , $\Delta E = E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1} = 0,7975 \text{ meV}$. . .	42
5.3	Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{ } = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Partícula incidente <i>spin up</i> em (a) e <i>spin down</i> em (b). O <i>spin - splitting</i> , $\Delta E = E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1} = 1,9511 \text{ meV}$. . .	43

5.4	Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{ } = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Partícula incidente <i>spin up</i> em (a) e <i>spin down</i> em (b). O <i>spin - splitting</i> , $\Delta E = E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1} = 3,4683 \text{ meV}$	43
5.5	Transmissividade total em função da energia para $\phi = 30^\circ$. (a) $k_{ } = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo; (b) $k_{ } = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo	44
5.6	Dependência do <i>spin-splitting</i> do pico de ressonância sobre $k_{ }$	44
5.7	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.	45
5.8	Transmissividade de elétrons polarizados, como função da energia do elétron para $k_{ } = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ a alguns valores de ϕ	46
5.9	Transmissividade total vs energia para alguns ângulos.	47
5.10	Spin Polarização em função da energia do elétron para alguns valores de ϕ e para $k_{ } = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo.	47
5.11	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 tensão externa $U=3 \text{ meV}$. Partícula incidente <i>spin up</i> em vermelho e <i>spin down</i> em verde.	49
5.12	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 tensão externa $U=6 \text{ meV}$. Partícula incidente <i>spin up</i> em vermelho e <i>spin down</i> em verde.	49
5.13	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 tensão externa $U=9 \text{ meV}$. Partícula incidente <i>spin up</i> em vermelho e <i>spin down</i> em verde.	50
5.14	Spin Polarização em função da energia do elétron para alguns valores de ϕ , tensão externa $U=3 \text{ meV}$ e $k_{ } = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixos.	50
5.15	Spin Polarização em função da energia do elétron para alguns valores de ϕ , tensão externa $U=6 \text{ meV}$ e $k_{ } = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixos.	51
5.16	Spin Polarização em função da energia do elétron para alguns valores de ϕ , tensão externa $U=9 \text{ meV}$ e $k_{ } = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixos.	51

Lista de Tabelas

4.1	Natureza das soluções de k_z	32
5.1	Parâmetros da estrutura de banda dos semicondutores GaSb e $Ga_xAl_{1-x}Sb$.	39

Capítulo 1

Introdução

Nos últimos anos, com o grande aumento da popularização dos computadores, a computação evoluiu rapidamente quanto ao poder de processamento, armazenamento e manipulação de informação. Um novo ramo da eletrônica, a spintrônica, ajudou nesta evolução onde nessa "nova" ciência o *spin* dos potadores é o personagem principal.

O conhecimento de mecanismos que permitam a manipulação dos spins são fundamentais. Entre eles, está a interação dependente do *spin*. Essa manipulação e/ou controle de graus de liberdade intrinsecamente não clássicos do spin do elétron em sistemas de matéria condensada é um tema fascinante e atual [1,2,3,4,5]

A spintrônica teve início nos anos 90 com *Datta e Das* [6], quando propuseram um novo dispositivo eletrônico onde a corrente de modulação surgia de uma precessão de spin devido ao acoplamento *spin-órbita* (SO) em um semicondutor de gap estreito, enquanto contatos magnetizados são usados para preferencialmente injetar e detectar orientações de spin. Alguns anos depois, em 1999, três experimentos cruciais [7,8,9], 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 com dopagem volumétrica tipo *n*. Surpreendentemente, os pesquisadores foram capazes de "arrastar" estes pacotes - preservando o spin dos mesmos - por distâncias da ordem de $100\mu\text{m}$! 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.

Sob a ótica de interesse tecnológico, há uma grande expectativa quanto á versatilidade e potencial de empregabilidade dos denominados "dispositivos spintrônicos" [1]. Nestes dispositivos, como já comentado, o spin dos portadores é o elemento relevante para sua operação e para o processamento, armazenamento e transmissão de informação. Ao que tudo indica, estes dispositivos inovadores parecem extremamente promissores a médio e longo prazos. Estamos nos referindo aqui a spintrônica em semicondutores.

Existem dois mecanismos de origem microscópica responsáveis pela interação *spin-órbita*: 1- o acoplamento *Rashba* produzido pela assimetria do potencial (**SIA**). O efeito de *Rashba* de separação de spins em semicondutores não magnéticos pode ser conseguido das seguintes formas: por meio da aplicação de um campo elétrico 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; 2- acoplamento de *Dresselhaus* introduzido pela quebra de simetria de inversão espacial no Volume (**BIA**) de materiais não centro-simétricos (como a estrutura ZincBlend), como mostrado na Fig. 1.1. Esta assimetria causa um acoplamento entre os estados do spin e o movimento dos portadores, e pode conduzir a uma separação (splitting) dos estados de spins; juntas, essas interações são responsáveis pela quebra da degenerescência de spins a campo zero [10,6].

Recentemente Perel [12] 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.

Nosso objetivo, neste trabalho, é estudar a transmissividade de elétrons polarizados no tunelamento ressonante em heteroestruturas semicondutoras não magnéticas de dupla barreira simétrica, usando-se a técnica da matriz de espalhamento [11], na aproximação da massa efetiva do modelo de Dresselhaus para a interação *spin-órbita*. O termo de

Dresselhaus é considerado em sua forma completa. A interação spin-órbita acopla estados de spin e o movimento dos elétrons de condução no plano perpendicular a direção de crescimento, o que abre a possibilidade de polarizar, manipular e detectar spins para moderados campos elétricos. Os valores das massas efetiva na heteroestrutura, são tomados iguais [13,14] e, em nossos cálculos, o parâmetro de Rashba é considerado desprezível.

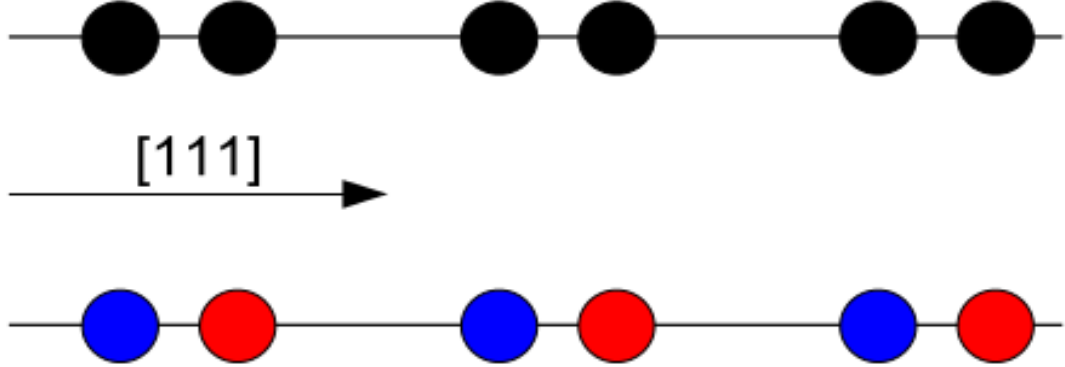


Figura 1.1: Átomos ao longo da direção $[111]$ de um diamante (acima) e uma estrutura zinc blende (abaixo). Os diferentes tipos de átomos (indicados por cores) impedem a simetria de inversão na estrutura zinc blende.

O tunelamento ressonante aparece como picos na curva da transmissividade, quando as energias E da partícula incidente se igualam àquelas dos estados quase-ligados, E_n (up ou down) da região do poço. Neste trabalho, usando o Hamiltoniano (2×2) completo de Dresselhaus (linear + quadrático e cúbico em k), investigamos os efeitos da interação spin-órbita no transporte de elétrons com spins polarizados em dupla barreira simétrica de $GaSb/Ga_xAl_{1-x}Sb$. 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 out* e *down out*). O modelo, então, permite o controle da separação de spin (*spin-splitting*) e da eficiência de polarização através do momento paralelo às camadas, $k_{||}$, e do ângulo ϕ , quanto maior *spin-mixing* (maior valor de $k_{||}$) maior *spin-splitting*. Para $\phi = 45^\circ$ encontramos uma eficiência de polarização de, aproximadamente, 100% o que realmente sugere que a heteroestrutura simétrica de $GaSb/Ga_xAl_{1-x}Sb$ podem ser usada para construção de filtro de spins.

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 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 simétrica.

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 $k_{||}$ e do ângulo ϕ .

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 de spins polarizados em dupla barreira simétrica. 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 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:

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

em que $u_k(\mathbf{r})$ é uma função que possui período igual ao da rede cristalina, sendo que \mathbf{k} é o vetor de onda reduzido, ou seja, restrito à 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 [15]:

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

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, $H = H_o + V(\mathbf{r})$, satisfaz a equação de Schrödinger

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

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 do sistema não perturbado. Sendo assim, obtém-se

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

onde as funções $F(\mathbf{R}_j)$ são 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

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

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

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

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

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

uma forma que expressa a invariância translacional de H_o .

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

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

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 às 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

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

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), projetando-se o resultado em um elemento $a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ da base de Wannier e utilizando a Eq.(2.12), encontra-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:

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

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 $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 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

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

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 semicondutor infinito com várias bandas acopladas, cujas extremidades ocorrem no ponto $\mathbf{k}_0 = 0$. Consideremos 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),

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

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

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

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

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

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 discutiremos algumas aproximações visando a utilização deste método para o cálculo das propriedades de transporte.

2.3 Aproximação da Massa Efetiva em Heteroestruturas

Consideremos uma heteroestrutura composta por dois semicondutores A e B, Fig. 2.1, 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-organicchemical vapour deposition"(MOCVD), que permitem estruturas coerentes, isto é, a constante de rede da camada epitaxial (A) na direção paralela a interface é forçada a ser igual à constante de rede do substrato (B), mantendo as interfaces completamente planas. Com uma boa aproximação, consideramos que as interfaces entre os semicondutores diferentes sejam bidimensionais, o que implica que os vetores de onda $k_{||} = (k_x, k_y)$ 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 à 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*.

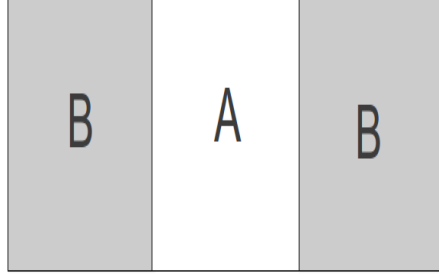


Figura 2.1: Ilustração de uma heteroestrutura do tipo poço quântico onde mostra a disposição das camadas dos materiais (A) e (B).

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..., 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* e 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 $\delta E_v = V(\mathbf{r}) = \text{constante}$. Desta forma, para encontrarmos os autoestados na heteroestrutura temos que resolver a equação de massa efetiva dentro de cada camada j , isto é

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

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* $u_{\nu 0}^{(j)}$ em cada material, o que extrapola o domínio da aproximação da massa efetiva.

Como ambos os materiais que formam a heteroestrutura apresentam o *gap* exatamente no ponto $\Gamma(k_0 = 0)$, admitimos que as componentes da função de *Bloch* $u_{\nu}^{(j)}$ 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 [16].

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:

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

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,

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

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

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

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 portadores (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 pelo modelo de *Dresselhaus* em sua forma completa 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

Para compreendermos as propriedades eletrônicas em heteroestruturas semicondutoras sujeita a interação *spin-órbita*, torna-se essencial um modelo razoável para calcularmos a estrutura eletrônica. Vários formalismos têm sido utilizados no cálculo da estrutura eletrônica, como a aproximação *Tight-Binding* [20], *Pseudopotenciais* [21], *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, nesta dissertação optamos pelo Hamiltoniano completo de *Dresselhaus*, baseado no método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$, para descrever as propriedades de transporte de *spins* polarizados em dupla barreira simétrica, uma vez que o mesmo é de 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 simétrica. 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 por meio de uma teoria de perturbação desenvolvida por *Löwdin*. O Hamiltoniano total é o Hamiltoniano de Dresselhaus. O Hamiltoniano de Dresselhaus, que considera o acoplamento *spin-órbita* em sua forma completa, gerado a partir da assimetria de inversão espacial no volume (**BIA**).

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

Inicialmente utilizado para determinar massas efetivas e funções de onda próximo aos pontos de alta simetria no espaço- k , o método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ introduzido por *Bardeen* [22] e *Seitz* [23], 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 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ [24] 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-se 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. 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 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

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

como 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, 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

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

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, $c_{nn'}$,

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

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

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. (3.9) 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:

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

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 para as 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* [25], *Kane* observou que uma escolha adequada de estados $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ 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 subsecção representação a $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 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:

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

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 Hamiltoniano $[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r})]$ e procedendo da mesma forma que a subseção anterior, encontramos

$$H(\mathbf{k}) \equiv H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \mathbf{k}^2 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + H_{SO1} + H_{SO2}, \quad (3.14)$$

onde

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

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

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} . Observa-se isso 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 muito pequeno, podendo ser desprezado na maioria dos cristais com simetria *zincblende*.

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

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

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 $E_n(\mathbf{k})$, mesmo para $\mathbf{k} = 0$. Isso é ilustrado na Fig.3.1, 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-degenerado 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*, 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 Γ_1 (Γ_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 $\mathbf{L} = \mathbf{1}$, sob as operações de simetria que pertencem à representação Γ_4 (Γ_7 e Γ_8 na presença de *spin*).

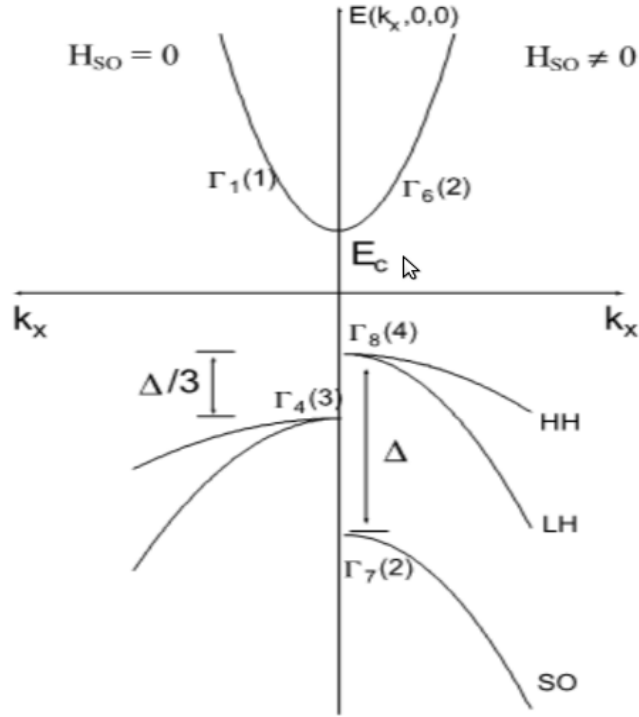


Figura 3.1: Representação esquemática da estrutura de banda dos componentes III-V, na vizinhança do ponto Γ , mostrando a lacuna fundamental (EC) e a energia *spin-órbita* (Δ). Os símbolos Γ_J , referem-se às representações das funções de Bloch sem *spin* (à esquerda) e com *spin* (à direita). Os números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

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

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

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

sendo h_{ij} 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

$$A = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0},$$

$$B = B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{x}}) + iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}),$$

$$C = B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{y}}) + iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{y}}),$$

$$D = B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{z}}) + iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{z}}),$$

$$B^* = B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{x}}) - iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}),$$

$$C^* = B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{y}}) + iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{y}}),$$

$$D^* = B_0(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{z}}) + iP_0(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{z}}),$$

$$E = E_v + Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0},$$

$$F = Nk_x k_y,$$

$$G = Nk_x k_z,$$

$$H = Nk_x k_y,$$

$$I = E_v + Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0},$$

$$J = Nk_y k_z,$$

$$K = E_v + Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0},$$

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 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 neste 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 dois estados do operador $S = 1/2$. Dessa forma considerando esses estados, usualmente representados na base $\{ | \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle \}$, os autoestados de S_z , o subespaço $s-p$ torna-se octodimensional e o Hamiltoniano de *Kane* toma a forma:

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

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 [26], isto é, tratando a interação dentro do subespaço $s-p$, 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* é da forma

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

Com o objetivo de simplificar o modelo, dando uma 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 $\{u_{n0}; n = 1, \dots, 8\}$:

$$u_{10} = |1/2, 1/2\rangle_{\Gamma_6} = |s \uparrow\rangle,$$

$$u_{20} = |3/2, 3/2\rangle_{\Gamma_8} = -\frac{1}{\sqrt{2}}|(x + iy) \uparrow\rangle,$$

$$u_{30} = |3/2, 1/2\rangle_{\Gamma_8} = -\frac{1}{\sqrt{6}}|(x + iy) \downarrow - 2z \uparrow\rangle,$$

$$u_{40} = |1/2, 1/2\rangle_{\Gamma_7} = \frac{1}{\sqrt{3}}|(x + iy) \downarrow - z \uparrow\rangle,$$

$$u_{50} = |1/2, -1/2\rangle_{\Gamma_6} = -|s \downarrow\rangle,$$

$$u_{60} = |3/2, -3/2\rangle_{\Gamma_8} = -\frac{1}{\sqrt{2}}|(x - iy) \downarrow\rangle,$$

$$u_{70} = |3/2, -1/2\rangle_{\Gamma_8} = \frac{1}{\sqrt{6}}|(x - iy) \uparrow + 2z \downarrow\rangle,$$

$$u_{80} = |1/2, -1/2\rangle_{\Gamma_7} = \frac{1}{\sqrt{3}}|(x - iy) \uparrow - z \downarrow\rangle.$$

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 [27]

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

$$\tilde{H}_d = \begin{bmatrix} P - Q & -D & -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}D^*} & \sqrt{2}Q \\ -D^* & P + Q & -\sqrt{2}C^* & \frac{D^*}{\sqrt{2}} \\ -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}D & -\sqrt{2}C & P - \Delta & 0 \\ \sqrt{2}Q & \frac{D}{\sqrt{2}} & 0 & P - \Delta \end{bmatrix}$$

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

onde $*$ denotam o conjugado Hermitiano, sendo

$$A = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c},$$

$$S = -\frac{1}{\sqrt{2}}\langle iS|H|X + iY\rangle,$$

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle iS|H|X - iY\rangle,$$

$$T = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}\langle iS|H|Z\rangle,$$

$$C = -\frac{1}{2\sqrt{3}}\langle X + iY|H|X - iY\rangle,$$

$$D = -\frac{1}{\sqrt{3}}\langle X + iY|H|Z\rangle,$$

$$P = \frac{1}{3}\langle X + iY|H|X + iY\rangle + \frac{1}{3}\langle Z|H|Z\rangle,$$

$$Q = \frac{1}{6}\langle X + iY|H|X + iY\rangle - \frac{1}{3}\langle Z|H|Z\rangle.$$

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 e o Hamiltoniano Total

O Hamiltoniano de *Kane* na Eq.(3.27) pode ser blocodiagonalizado [28] 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 e 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:

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

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

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

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

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

Assim sendo, podemos escrever o Hamiltoniano Total como

$$H_T = \begin{bmatrix} H_{++} & H_{+-} \\ H_{-+} & H_{--} \end{bmatrix}, \quad (3.35)$$

onde

$$H_{++} = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)k_z^2 + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)k_{\parallel}^2 + \alpha_D k_z k_{\parallel}^2 \cos(2\phi),$$

$$H_{--} = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)k_z^2 + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)k_{\parallel}^2 - \alpha_D k_z k_{\parallel}^2 \cos(2\phi),$$

$$H_{+-} = (-\alpha_D k_{\parallel} e^{i\phi} k_z^2 + i\alpha_D k_{\parallel}^3 e^{-i\phi} \cos \phi \sin \phi)$$

$$H_{-+} = (-\alpha_D k_{\parallel} e^{i\phi} k_z^2 + i\alpha_D k_{\parallel}^3 e^{-i\phi} \cos \phi \sin \phi)^*.$$

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 simétrica, usando o formalismo da matriz de espalhamento na aproximação de massa efetiva do modelo de *Dresselhaus* completo.

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 $k_{||}$; 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 [12], 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

$$\begin{pmatrix} a_n \\ b_0 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_0 \\ b_n \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

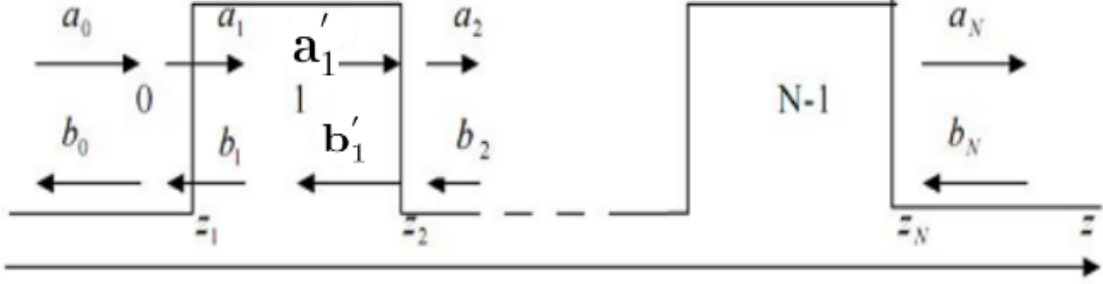


Figura 4.1: Heteroestrutura com N camadas. A figura mostra os coeficientes das ondas incidentes e das ondas refletidas ou espalhadas em cada região.

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, determinar-se as funções envelopes $F_{\sigma=\uparrow,\downarrow}(k_z, k_{\parallel}, \phi)$, para cada tipo de polarização σ , \uparrow (*up*) ou \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.(3.35) e $F(\mathbf{r}) = (F_{\uparrow}, F_{\downarrow})$ 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

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

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:

$$(H - EI)F_{\sigma}(\mathbf{k}) = 0, \quad (4.5)$$

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* (-) a seguir

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

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

$$\gamma(k_\parallel, k_z, \phi) = \alpha_D^2 k_\parallel^4 k_z^2 \cos(4\phi) + \alpha_D^2 k_\parallel^2 k_z^4, \quad (4.11)$$

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

e 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

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

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

$$c = E^2 - 2E\left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)^2 k_{\parallel}^4 - \delta(k_{\parallel}) \quad (4.16)$$

e os sinais (+) 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:

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

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

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

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 $GaSb/Ga_xAl_{1-x}Sb$.

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

Tabela 4.1: Natureza das soluções de k_z

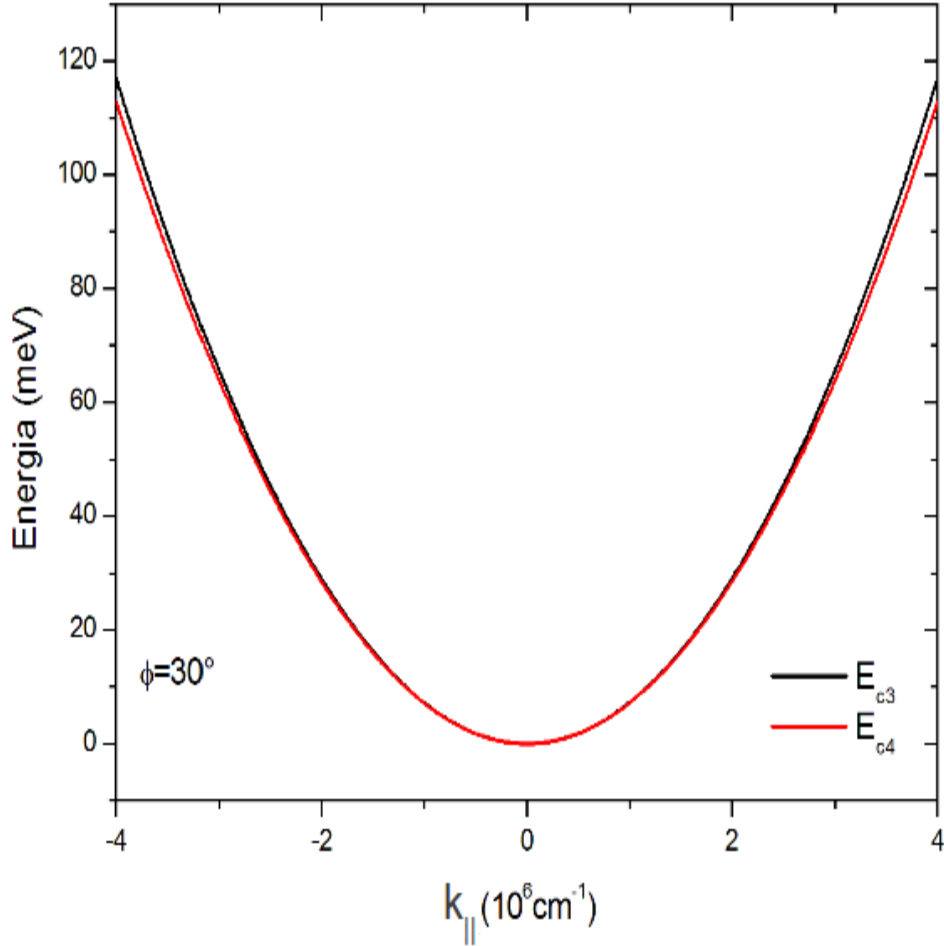


Figura 4.2: Energias críticas E_{c3} e E_{c4} em função do parâmetro $k_{||}$, com $\phi = 30^\circ$.

4.2 Formalismo da Matriz 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 total 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, $k_{||} = (k_x, k_y)$. 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 $e^{ik_{\parallel}\rho}$, 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 contida na referência [28], 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 da 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 [29].

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

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 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

$$\mathbf{S}_{n+1} = \begin{pmatrix} (\mathbf{M}_{n+1})_{11} & -(\mathbf{M}_n)_{12} \\ (\mathbf{M}_{n+1})_{21} & -(\mathbf{M}_n)_{22} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} (\mathbf{M}_n)_{11} & -(\mathbf{M}_{n+1})_{12} \\ (\mathbf{M}_n)_{21} & -(\mathbf{M}_{n+1})_{22} \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

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 $k_z = f(E, k_{\parallel}, \phi)$ [29].

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 [27]. 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 simétrica 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 simétrica.

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 da heteroestrutura como combinações lineares das funções do volume, vamos calcular a transmissividade de elétrons polarizados num sistema de dupla barreira simétrica, 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 [30], os coeficientes de transmissão são calculados, usando-se a definição para a corrente de probabilidade

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

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.(4.36), as expressões para essas correntes são:

$$[j_{z\sigma}^+]_0 = [a_0^\sigma]^2 Re[\mathbf{F}_\sigma^\dagger(+k_{z\sigma}) \mathbf{J}_{z\sigma}(+k_{z\sigma}) \mathbf{F}_\sigma(+k_{z\sigma})], \quad (4.38)$$

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

$$[j_{z\sigma}^+]_4 = [a_4^\sigma]^2 Re[\mathbf{F}_\sigma^\dagger(+k_{z\sigma}) \mathbf{J}_{z\sigma}(+k_{z\sigma}) \mathbf{F}_\sigma(+k_{z\sigma})]. \quad (4.39)$$

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} ,

$$T_{\sigma \rightarrow \sigma'}(E, k_{||}, \phi) = Re[(t_{\sigma'}^\sigma)^*(t_{\sigma'}^\sigma) \frac{\langle \mathbf{F}_{\sigma'}^+ | \mathbf{J}_{z\sigma'}^+ | \mathbf{F}_{\sigma'}^+ \rangle_{z=z_4}}{\langle \mathbf{F}_\sigma^+ | \mathbf{J}_{z\sigma}^+ | \mathbf{F}_\sigma^+ \rangle_{z=z_0}}] \quad (4.40)$$

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*)

$$P = \frac{(T_{\uparrow \rightarrow \uparrow} + T_{\downarrow \rightarrow \uparrow}) - (T_{\uparrow \rightarrow \downarrow} + T_{\downarrow \rightarrow \downarrow})}{(T_{\uparrow \rightarrow \uparrow} + T_{\downarrow \rightarrow \uparrow}) + (T_{\uparrow \rightarrow \downarrow} + T_{\downarrow \rightarrow \downarrow})}. \quad (4.41)$$

No próximo Capítulo discutiremos os resultados numéricos para o cálculo da transmissividade, bem como a polarização em sistemas de dupla barreira simétrica obtidos a partir do formalismo até aqui desenvolvido. Em todos os casos ali relatados, escolhemos o sistema formado por camadas de *GaSb* (poço) e *Ga_xAl_{1-x}Sb* (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. 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.

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 simétrica. Antes, porém, faremos alguns comentários sobre o sistema usado neste trabalho e a apresentação dos resultados.

Os resultados que serão discutidos mais adiantes, referem-se às heteroestruturas de

dupla barreira simétrica de $GaSb/Ga_xAl_{1-x}Sb$, cujos os parâmetros de massa efetiva e *Dresselhaus* estão listados na Tab.(5.1), que são tomados iguais em cada camada, de acordo com [14]. O potencial da barreira e do poço valem, respectivamente, $V_b = 230$ meV e $V_w = -200$ meV. A largura da barreira e do poço valem, respectivamente, $L_b = 50$ Å e $L_w = 30$ Å. A Fig. 5.1 abaixo, mostra os esquema da heteroestrutura.

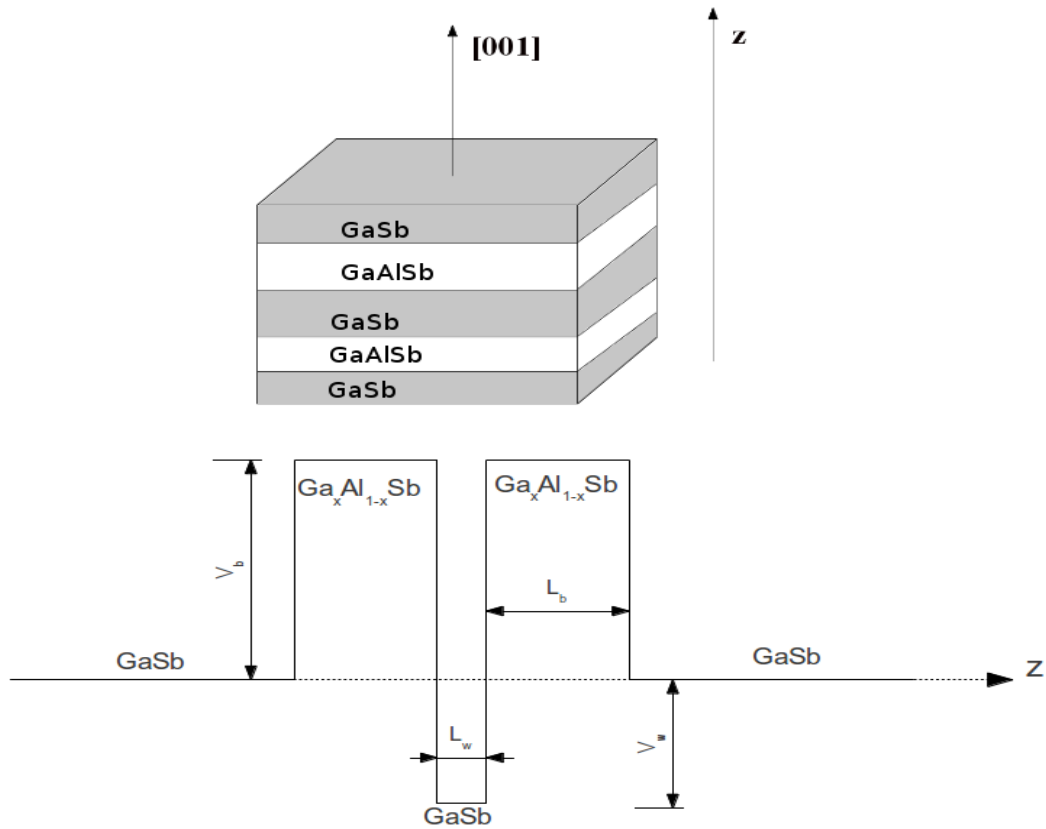


Figura 5.1: Representação esquemática do sistema de dupla barreira simétrica.

	GaSb	GaAlSb
$\alpha_D(\text{meV}\text{\AA}^3)$	0,076	0,076
m^*/m	0,053	0,053

Tabela 5.1: Parâmetros da estrutura de banda dos semicondutores GaSb e $Ga_xAl_{1-x}Sb$.

5.1 Tunelamento Dependente de Spin em Dupla Barreira Simétrica (50,30,50)

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 de dupla barreira simétrica dá origem às 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 volume (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*. Nesta seção, vamos analisar os efeitos do *spin mixing* (mistura) no processo de tunelamento de spins polarizados em dupla barreira simétrica de $GaSb/Ga_xAl_{1-x}Sb$ com dimensões (50, 30, 50) Å para $\phi = 30^\circ$ e $k_{\parallel} = 0, 5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{\parallel} = 1, 0 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $k_{\parallel} = 2, 0 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$.

5.1.1 Transmissividade de Spins Polarizados sem Campo

Nas Figs.5.2, 5.3 e 5.4 mostramos, respectivamente, para $k_{\parallel} = 0, 5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{\parallel} = 1, 0 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $k_{\parallel} = 2, 0 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, as transmissividades dependentes de *spin* incidente em dupla barreira simétrica de $GaSb/Ga_xAl_{1-x}Sb$ (50, 30, 50) Å, com $\phi = 30^\circ$, 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 os casos, para cada incidência (*up* ou *down*), temos dois canais de saída: *up* e *down*. Os picos nas curvas de transmissão correspondem aos estados ressonantes $E_{\uparrow 1}(\text{up})$ e $E_{\downarrow 1}(\text{down})$ que, degenerados em $k_{\parallel} = 0$, separam-se quando incluímos a interação *spin-órbita*. Para a incidência *spin up* ou *down*, os picos ressonantes $E_{\uparrow 1}(\text{up})$ e $E_{\downarrow 1}(\text{down})$, 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*. Isto é mais evidente à medida

que k_{\parallel} aumenta, como mostrado nas Figs. 5.3 e 5.4, para $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, respectivamente, em comparação com $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ na Fig.5.2, onde o *mixing* é fraco. Na Fig.5.5 mostramos, respectivamente, para $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, as transmissividades *up total* e *down total* para os mesmos parâmetros das figuras anteriores comparadas com o caso sem o acoplamento *spin-órbita*, $k_{\parallel} = 0$. O primeiro estado é classificado como *spin down*, porque para a transmissividade *down in* ele aparece com um pico de intensidade maior para o canal de saída *down out*. Analogamente, o segundo estado é classificado como *spin up*, porque ele aparece com o segundo pico de maior intensidade para a saída *up out*. Podemos observar que a separação de energia dos estados *up* e *down*, também chamada de *spin-splitting*, depende fortemente do momento paralelo k_{\parallel} . Dessas figuras podemos notar que o *spin-splitting* para $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ valem, respectivamente, $\Delta E = |E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1}| = 1,9511$ e $3,4683$ meV. Quanto maior o valor do momento paralelo k_{\parallel} , maior acoplamento *spin-órbita* e maior *spin-splitting*. Isso é mais evidenciado na Fig.5.6, onde calculamos o *spin-splitting* através da matriz espalhamento. Para finalizar, podemos observar na Fig.5.5 que à medida que o *mixing* aumenta, dimui o caráter *spin down* e *spin up*. Isto pode ser verificado pela diminuição da transmissividade nos estados ressonantes, que influencia profundamente na spin polarização.

5.1.2 Polarização de Spin

Vamos agora discutir o efeito da interação *spin-órbita* na eficiência de polarização (P) dos elétrons de condução em dupla barreira para $\phi = 30^\circ$ e $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, $1 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ e $2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$. Na Fig.5.7 mostra-se a eficiência de polarização como função da energia para diferentes vetores de onda paralelo às camadas. Devido as variações nas intensidades das curvas de transmissão *up out* e *down out* para as entradas *up in* ou *down in*, a eficiência de polarização depende fortemente da energia incidente e do vetor de onda k_{\parallel} paralelo. Podemos observar que a eficiência de polarização atinge nos níveis ressonantes os valores de $81\% \rightarrow 82\%$, $70\% \rightarrow 71\%$, $54\% \rightarrow 56\%$, para $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, respectivamente. Para $\phi = 30^\circ$ e já comentado, a medida que k_{\parallel}

aumenta (*mixing*), diminui o caráter *spin down* e *spin up*, contribuindo para a diminuição da polarização de spin. Assim, é de interesse analisar a polarização de *spin* para outros valores de ϕ , com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo.

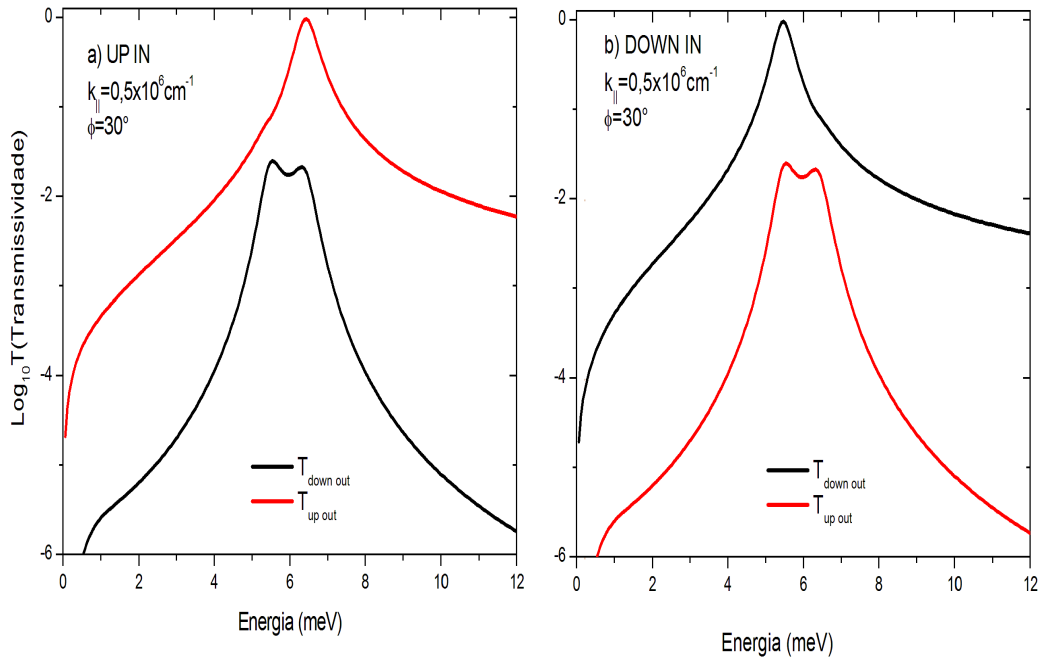


Figura 5.2: Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{\parallel} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Partícula incidente *spin up* em (a) e *spin down* em (b). O *spin - splitting*, $\Delta E = |E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1}| = 0,7975 \text{ meV}$.

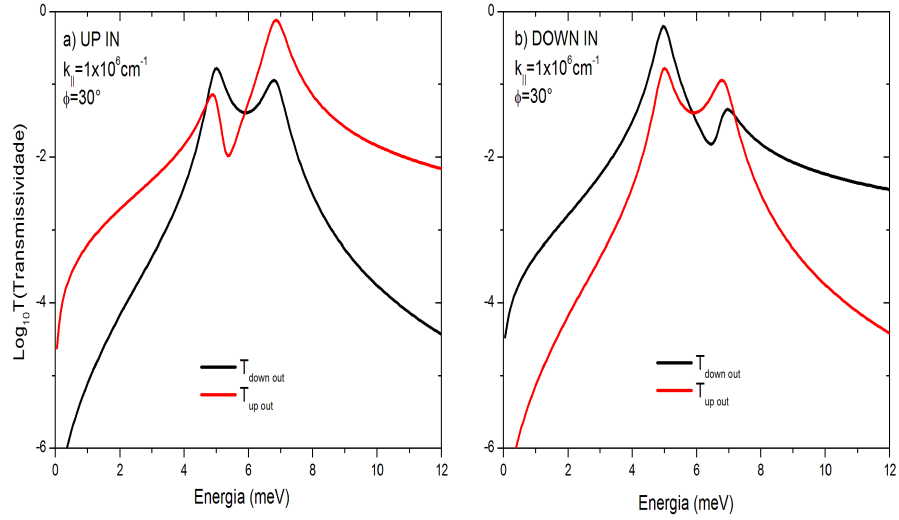


Figura 5.3: Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{||} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Partícula incidente *spin up* em (a) e *spin down* em (b). O *spin - splitting*, $\Delta E = |E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1}| = 1,9511 \text{ meV}$.

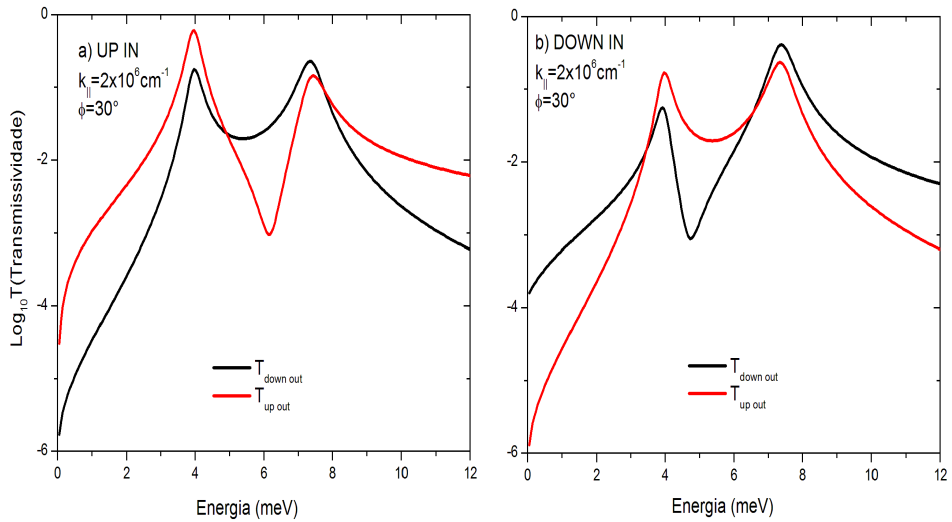


Figura 5.4: Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{||} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Partícula incidente *spin up* em (a) e *spin down* em (b). O *spin - splitting*, $\Delta E = |E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1}| = 3,4683 \text{ meV}$.

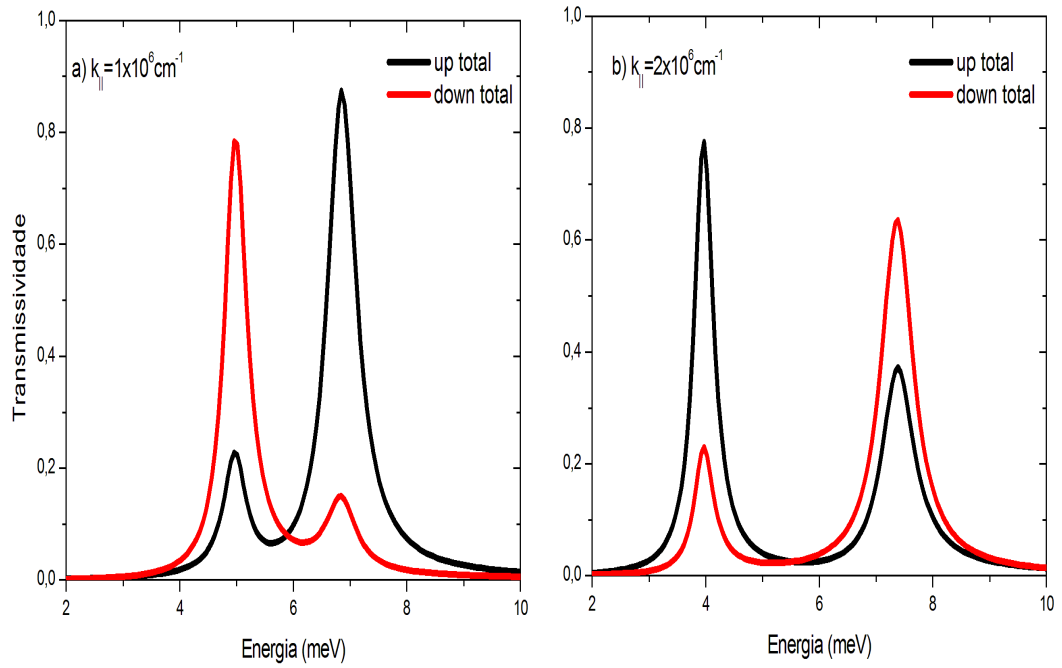


Figura 5.5: Transmissividade total em função da energia para $\phi = 30^\circ$. (a) $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo; (b) $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo

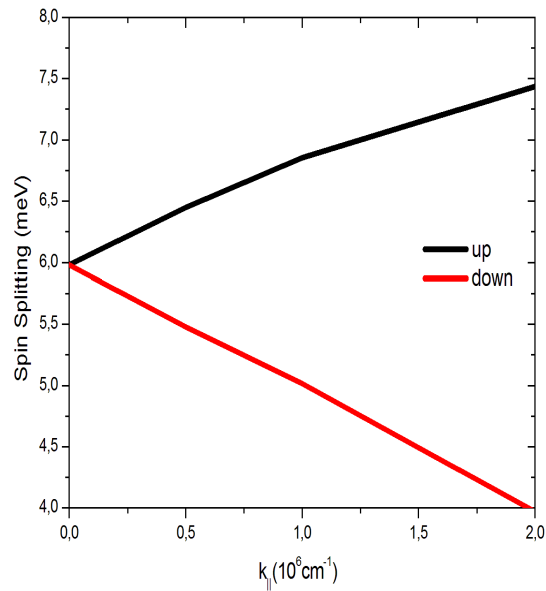


Figura 5.6: Dependência do *spin-splitting* do pico de ressonância sobre k_{\parallel} .

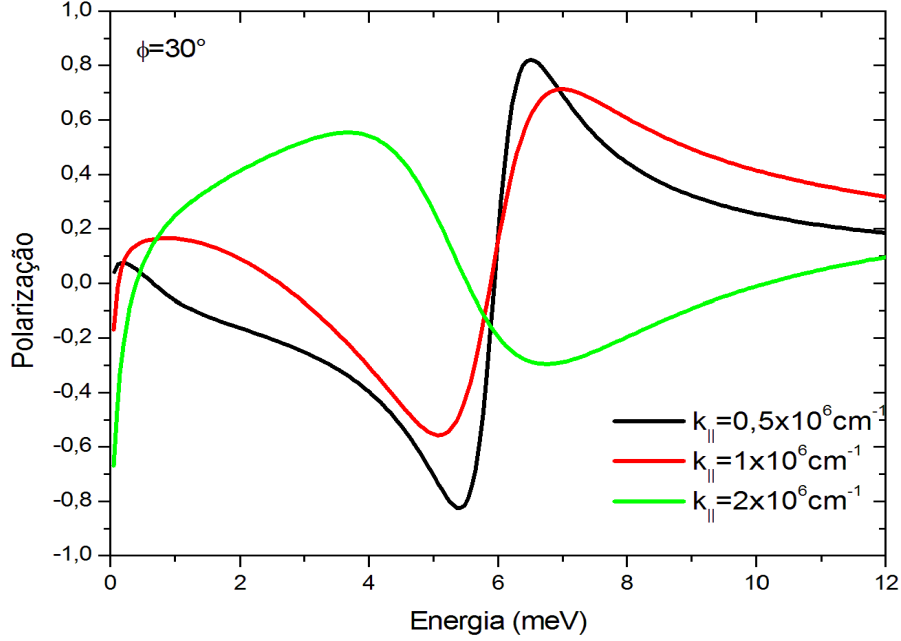


Figura 5.7: Polarização em função da energia do elétron para $k_{||} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{||} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $k_{||} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, com $\phi = 30^\circ$ fixo.

5.1.3 Polarização de Spin para outros Valores de ϕ

Vamos agora discutir o efeito da interação *spin-órbita* na eficiência de polarização (P) dos elétrons de condução, para $k_{||} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo e $\phi = 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ e 90° . Na Fig.5.9 mostramos a transmissividade de *up total* e *down total*, para $\phi = 30^\circ$ e 60° (linhas pontilhadas, preta-up e vermelha-down), $\phi = 45^\circ$ (linhas cheias, preta-up e vermelha-down) e $\phi = 90^\circ$ (linhas tracejadas, preta-up e vermelha-down). Quando comparamos todas as transmissividades *up out* e *down out*, Fig. 5.8, observamos que as posições dos picos ressonantes variam fracamente com a energia, e para $\phi = 45^\circ$ os estados up e down são quase desacoplados (*mixing* é baixo), uma vez que no termo do Hamiltoniano da diagonal $\alpha_D k_{||}^2 \cos(2\phi)$ se anula. Assim, 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 down no coletor, e quanto menor o *spin-mixing*, maior a intensidade do pico ressonante up e down para as respectivas saídas *up out* e *down out*. Desta forma espera-se para o ângulo de 45° uma alta eficiência

de polarização. Isto é observado na Fig.5.10 onde apresentamos a polarização P com momento paralelo $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo e $\phi = 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ e 90° . Pode-se observar que a polarização atinge nos níveis ressonantes valores baixos entre $50\% \rightarrow 55\%$, $50\% \rightarrow 55\%$, $40\% \rightarrow 45\%$ para os ângulos $\phi = 30^\circ, 60^\circ$ e 90° respectivamente; em comparação com $\phi = 45^\circ$ onde a polarização atinge quase 100% , $95\% \rightarrow 100\%$, nos níveis ressonantes up e down, como esperado.

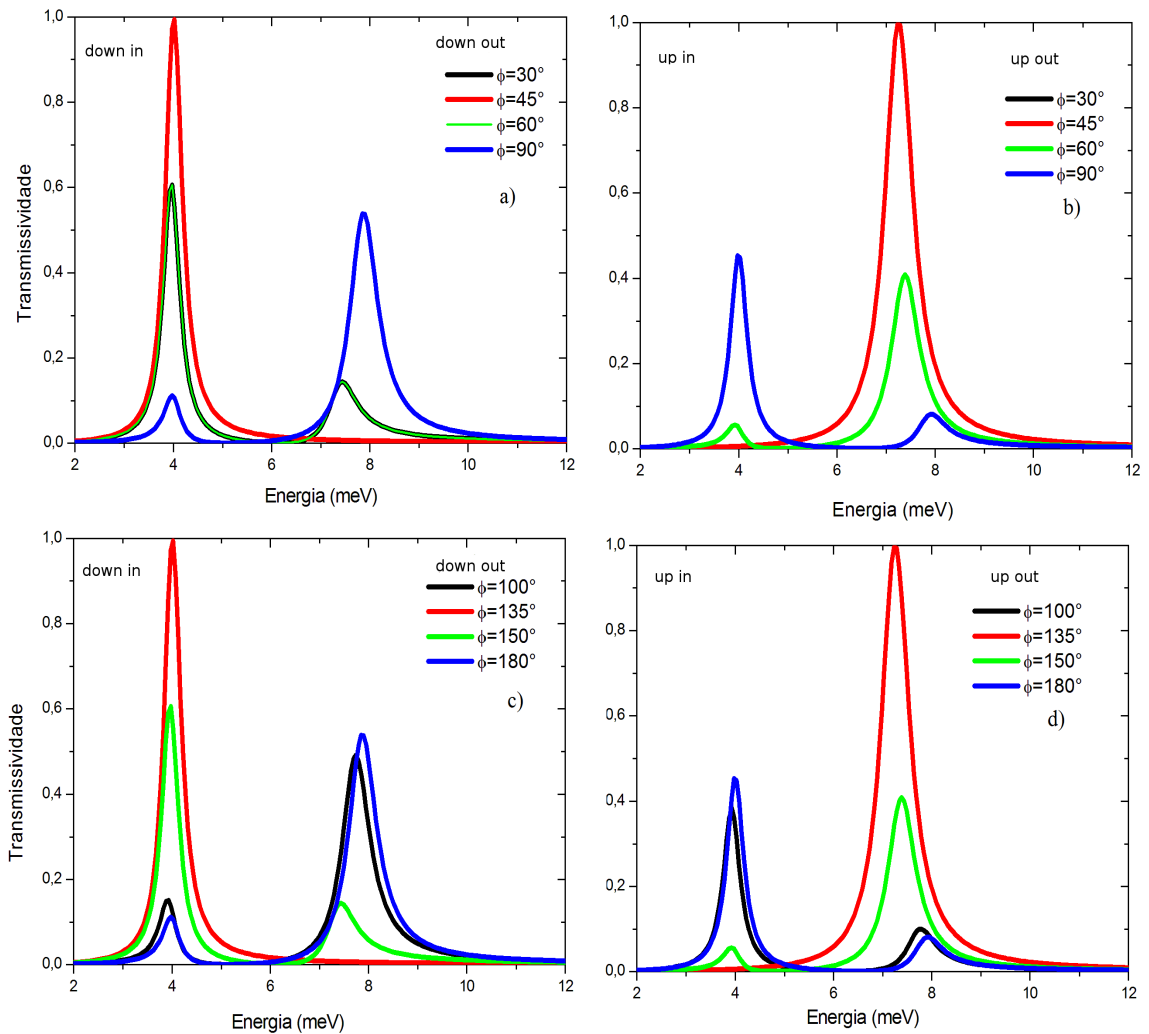


Figura 5.8: Transmissividade de elétrons polarizados, como função da energia do elétron para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ a alguns valores de ϕ .

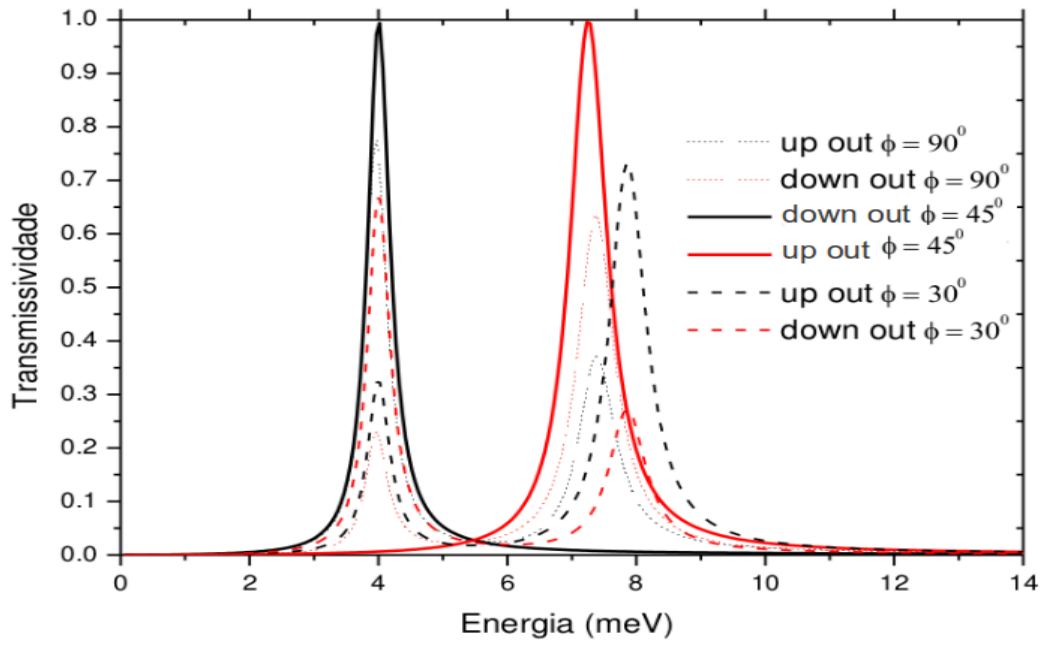


Figura 5.9: Transmissividade total vs energia para alguns ângulos.

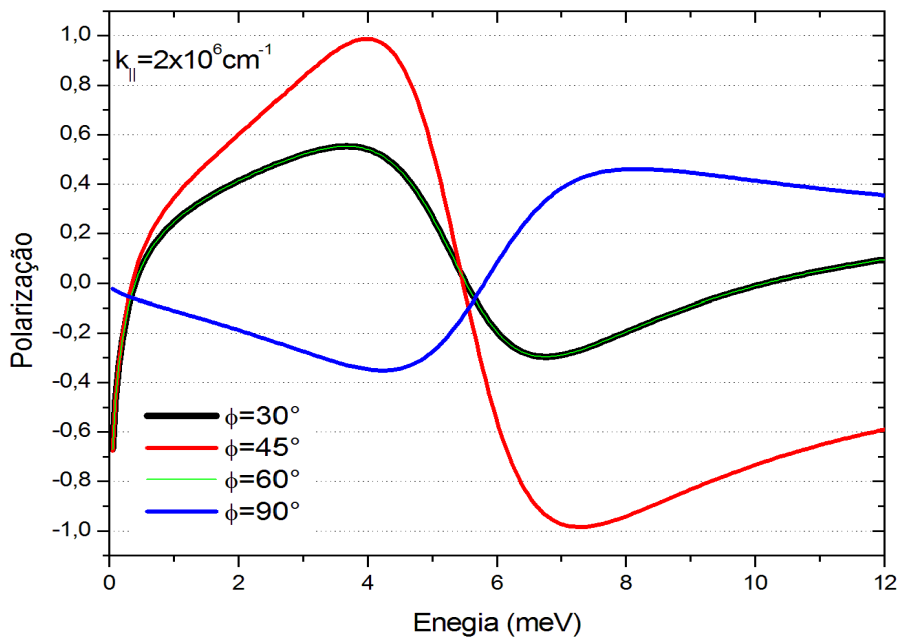


Figura 5.10: Spin Polarização em função da energia do elétron para alguns valores de ϕ e para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixo.

5.2 Transmissividade de Spins Polarizados com Campo

Nas Figs. 5.11, 5.12 e 5.13 mostramos as transmissividades dependente de *spin*, para $\phi = 30^\circ$ e $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, com tensão externa aplicada de $U=3$ meV, 6 meV e 9 meV, respectivamente. A medida que aumenta a tensão externa, os picos de ressonância sofrem um deslocamento para regiões de energias mais baixas. Além disso, a assimetria do potencial efetivo introduzido pelo campo elétrico, faz decair a intensidade dos picos [13].

Nas Figs.5.14, 5.15 e 5.16 mostramos a eficiência de polarização para $\phi = 30^\circ$ e $k_{\parallel} = 1,0 \text{cm}^{-1}$ com tensão externa aplicada de $U=3$ meV, 6 meV e 9 meV, respectivamente. Analogamente aos picos de ressonância com tensão externa, a medida que se aumenta a tensão externa, a polarização sofre um deslocamento para regiões de energias mais baixas. Nos níveis ressonantes, os valores aumentam a medida que a tensão externa aumenta: para $\phi = 30^\circ$ e 60° atingi valores de $79\% \rightarrow 81\%$, $84\% \rightarrow 85\%$, $86\% \rightarrow 87\%$ para $U=3, 6$ e 9 meV respectivamente; para $\phi = 90^\circ$ atingi valores de $70\% \rightarrow 72\%$, $74\% \rightarrow 76\%$, $77\% \rightarrow 79\%$ para $U=3, 6$ e 9 meV respectivamente e para $\phi = 45^\circ$ atingi valores de $90\% \rightarrow 95\%$ para $U=3, 6$ e 9 meV. Como de se esperar, a spin polarização é de quase 100% para o ângulo de 45° .

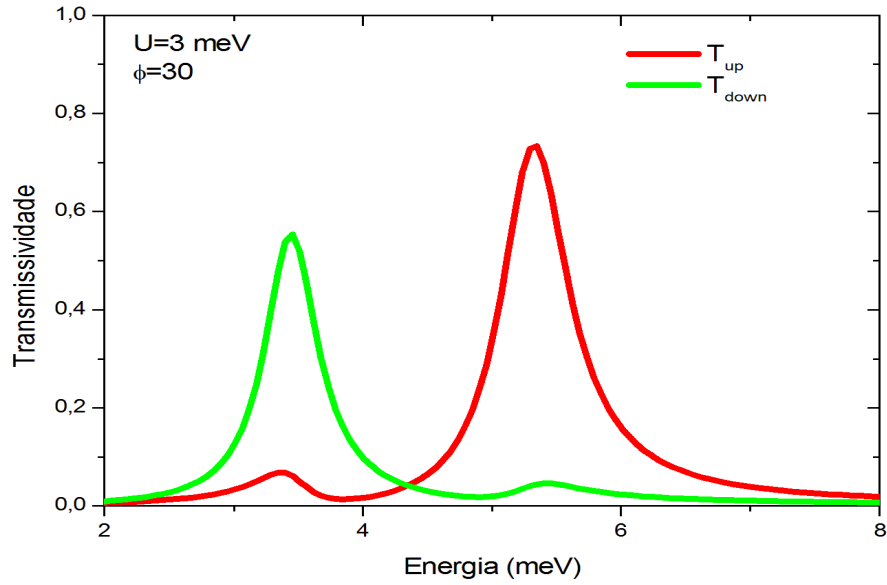


Figura 5.11: Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{||} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e tensão externa $U=3$ meV. Partícula incidente *spin up* em vermelho e *spin down* em verde.

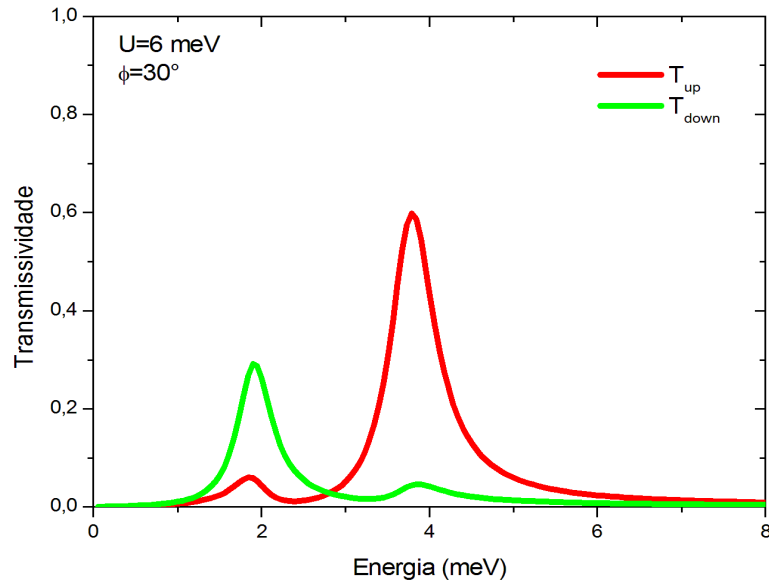


Figura 5.12: Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{||} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e tensão externa $U=6$ meV. Partícula incidente *spin up* em vermelho e *spin down* em verde.

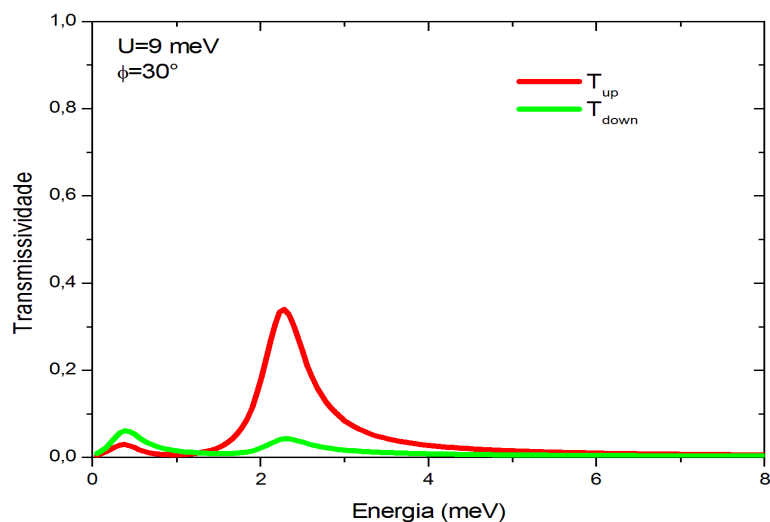


Figura 5.13: Transmissividade de elétrons polarizados, T_{up} e T_{down} , como função da energia do elétron para $k_{||} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e tensão externa $U = 9 \text{ meV}$. Partícula incidente *spin up* em vermelho e *spin down* em verde.

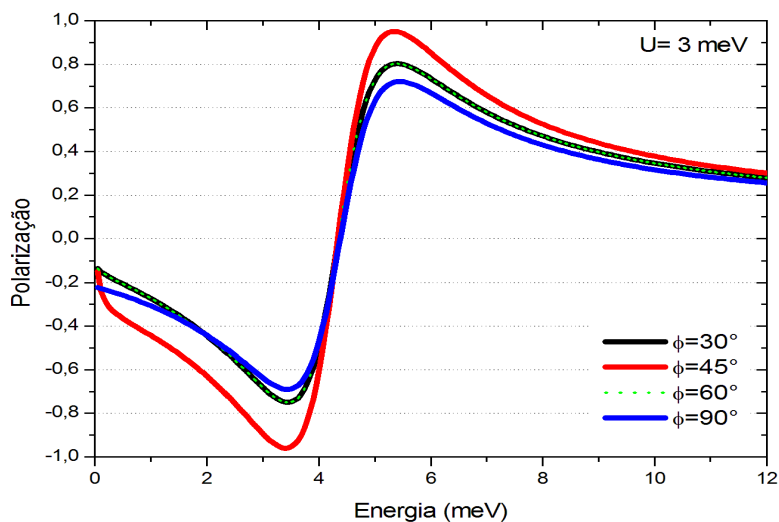


Figura 5.14: Spin Polarização em função da energia do elétron para alguns valores de ϕ , tensão externa $U = 3 \text{ meV}$ e $k_{||} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixos.

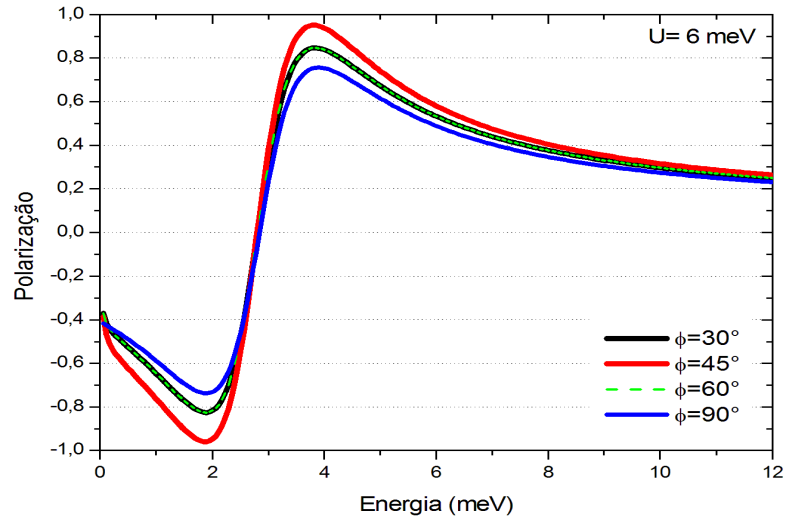


Figura 5.15: Spin Polarização em função da energia do elétron para alguns valores de ϕ , tensão externa $U=6 \text{ meV}$ e $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixos.

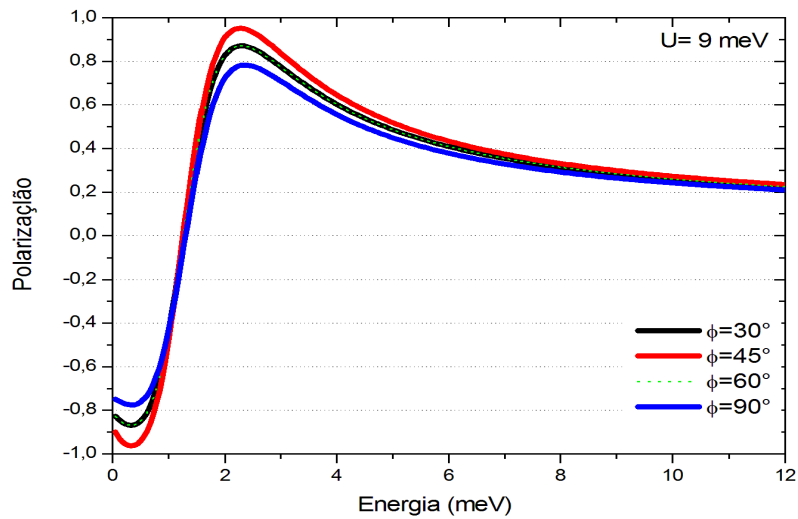


Figura 5.16: Spin Polarização em função da energia do elétron para alguns valores de ϕ , tensão externa $U=9 \text{ meV}$ e $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ fixos.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho apresentamos a transmissividade de elétrons polarizados em heteroestrutura semicondutora de $GaSb/Ga_xAl_{1-x}Sb$ usando a técnica da matriz de espalhamento na aproximação da massa efetiva do modelo de *Dresselhaus* completo. Este problema foi tratado teoricamente por Gong, Liang e Ban na aproximação de massa efetiva usando o modelo de *Dresselhaus* linear [13]. Esses autores também verificaram como a transmissividade se comportava ao se aplicar tensões externas e constataram que à medida que a tensão aumentava, os picos de ressonância e polarização de spin, deslocavam-se para regiões de energias mais baixas. Em ambos os casos, com e sem tensão, a polarização de spin atinge 100%.

Ao fixar o ângulo de 30° , Figs. 5.2, 5.3 e 5.4, observamos nas curvas de transmissividade uma separação maior dos níveis ressonantes a medida que o momento paralelo aumenta. Essa separação varia quase linearmente com $k_{||}$ uma contribuição que vem do termo linear de *Dresselhaus*. Observamos ainda para esse ângulo que a polarização de spin atinge nos níveis ressonantes os valores de $81\% \rightarrow 82\%$, $70\% \rightarrow 71\%$, $54\% \rightarrow 56\%$, para $k_{||} = 0,5 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $k_{||} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $k_{||} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ respectivamente, e a medida que $k_{||}$ 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 $k_{||}$, Fig. 5.7.

Fixando o parâmetro $k_{||} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e variando ϕ , Fig. 5.8, 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. Como era de se esperar, para $\phi = 45^\circ$, Fig.5.10, tem-se uma alta eficiência de polarização, quase 100%, devido o *mixing* ser baixo.

Ao aplicar a tensão externa, ocorre um deslocamento nos picos ressonantes para as regiões de energias mais baixas, bem como a diminuição da intensidade a medida que a tensão aumenta, Figs.5.11, 5.12 e 5.13. Para tensões maiores que 9 meV, não ocorrerá o tunelamento ressonante. Analogamente ocorrerá com a spin polarização, mas a medida que a tensão aumenta, também aumenta os valores nos níveis ressonantes, Figs.5.14, 5.15 e 5.16. Para $\phi = 30^\circ$ e 60° atingi valores de 79% \rightarrow 81%, 84% \rightarrow 85%, 86% \rightarrow 87% para U=3, 6 e 9 meV respectivamente; para $\phi = 90^\circ$ atingi valores de 70% \rightarrow 72%, 74% \rightarrow 76%, 77% \rightarrow 79% para U=3, 6 e 9 meV respectivamente e para $\phi = 45^\circ$ atingi valores de 90% \rightarrow 95% para U=3, 6 e 9 meV. Novamente para $\phi = 45^\circ$ a eficiência de polarização é de quase 100%.

Diferentemente de [13], o modelo com Hamiltoniano completo de *Dresselhaus*, apesar de mais complexo, permite um controle maior nas propriedades eletrônicas através do momento paralelo às camadas, $k_{||}$, e do ângulo polar ϕ . Portanto, a interação spin-órbita de *Dresselhaus* é um mecanismo 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 Bibliográficas

- [1] Malajovich et al., "Persistent sourcing of coherent spins for multifunctional semiconductors", Nature (London) **441**, 770 (2001).
- [2] M.L.Roukes, "Electronics in a spin", Nature (London) **411**, 747 (2001).
- [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. [3].
- [6] S. Datta e B. Das. Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [7] J. M. Kikkawa e D. D. Awschalom. "Lateral drag of spin coherence in gallium arsenide", Nature (London) **397**, 139 (1999).
- [8] R. Fiederling et al. "Injection and detection of a spin-polarized current in a light-emitting diode ", Nature (London) **402**, 787 (1999).
- [9] Y. Ohno et al. "Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure", Nature (London) **402**, 790 (1999).
- [10] E.A. de Andrada e Silva , G.C. La Rocca e F. Bassani. Phys. Rev. B **55** (1997) 16293.

- [11] M. Cahay, M. McLennan e S. Datta. Phys. Rev. B **17**, 10125 (1988).
- [12] V.I. Perel, S. A. Tarasenko, I.N. Yassievich, S.D. Ganichev, V.V. Bel'kov e W. Prettl. Phys. Rev. B **67** (2003) 201304.
- [13] J. Gong, X.X. Liang e S.L. Ban. J. Appl. Phys. **102**, 073718 (2007).
- [14] M. M. Glazov, P. S. Alekseev, M. A. Odnoblyudov, V. M. Chistyakov, S.A. Tarasenko e I. N. Yassievich. Phys. Rev. B **71**, 155313 (2005).
- [15] J. M. Ziman, *Principles of Theory of Solids*, Cambridge University Press, London, (1972) p. 173
- [16] 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.
- [17] S. R. White, L. J. Sham, Phys. Rev. Lett, **47**, 879-882, (1981).
- [18] A. Voskoboynikov, S.S. Liu, C.P. Lee, O. Tretyak, J. Appl. Phys. **87** (2000) 387.
- [19] K. Gnanasekar and K. Navaneethakrishnan, Physica E **28** (2005) 328-332.
- [20] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (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.
- [21] B. K. Ridley. Quantum Processes in Semiconductors. Clarendon Press, Oxford, (1982).
- [22] J. Bardeen, J. Phys. Chem. Solids, **6**, 367-371, (1938).
- [23] F. Seitz. The Modern Theory Solids, capítulo **10**, página 352. McGraw Hill, New York, (1940).

- [24] E.O. Kane, Semiconductors and Semimetals, R. K. Williarddson, A.C. Beer, eds. (Academic Press, New York, 1966) vol.1, p.75.
- [25] P. Löwdin, J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951).
- [26] 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.
- [27] M. H. Weiler, "Semiconductors and Semimetals", R. K. Williarddson and A.C. Beer, eds. (Academic Press, New York, 1981) vol.16, p.119.
- [28] Chun-Nan Chen, Wei-Long Su, Kuo-Ching Chang, Sheng-Hsiung Chang, Jih-Chen Chiang, Ikai Lo, Wan-Tsang Wang, Hsiu-Fen Kao, e Meng-En Lee, Journal of Applied Physics **104**, 024901 (2008).
- [29] A C. Bittencourt, A. M. Cohen, G. E. Marques, Phys. Rev. B **57**, 4525 (1998).
- [30] 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.