

Iann Cunha

**Transporte dependente de spin em nanofios
semicondutores controlado via interação
spin-órbita**

São Carlos — SP

2019

Iann Cunha

**Transporte dependente de spin em nanofios
semicondutores controlado via interação spin-órbita**

Dissertação submetida à Coordenação de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal de São Carlos, como requisito parcial para obtenção do título em Mestre em Física.

Universidade Federal de São Carlos – UFSCar

Departamento de Física

Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Leonardo Kleber Castelano

São Carlos — SP

2019



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Física

Folha de Aprovação

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Iann Cunha, realizada em 26/04/2019:

Prof. Dr. Leonardo Kleber Castelano
UFSCar

Prof. Dr. Guo-Qiang Hai
USP

Prof. Dr. Matheus Paes Lima
UFSCar

Agradecimentos

Os agradecimentos principais são direcionados ao meu orientador, Leonardo Castellano, que teve muita paciência em me explicar diversos pontos do trabalho, assim como me ajudar em construí-lo e redigi-lo.

Agradeço também meus amigos Jeremias, P.H. e Santiago, que por estudarmos na mesma área da ciência e estaremos presentes quase que todos os dias durante os anos da realização deste trabalho, pudemos realizar diversas discussões engrandecendo, nem que por pouco, meu raso conhecimento na física. Com mesma força agradeço à Arthur, Cassius, Débora, Emilene, Guiga, Gustavo, Hindi, Leonardo, Luiza e Mateus que durante o curso me apoiaram em minhas escolhas, assim como Bruno, Felipe, Guga e Túlio que me acompanharam antes mesmo da turbulência da graduação. Agradeço, ainda, os queridos distantes Carol, Henrik e Thea, que tenho apreço e saudades.

À CAPES, pelo suporte financeiro, sem o qual não seria possível a realização deste trabalho.

Finalmente à minha família que, mesmo não entendendo quase nada e muitas vezes não gostando de ciências exatas, muito se esforçaram para me ajudar a me manter nos estudos. Estão sempre em meu coração.

“Knowledge, like air, is vital to life. Like air, no one should be denied it.”

— Alan Moore, V for Vendetta

Resumo

Esse trabalho foi dedicado ao estudo teórico de nanoestruturas semicondutoras visando a implementação do transporte eletrônico dependente de spin. O objetivo foi estudar as propriedades de transporte de elétrons considerando a interação de spin-órbita de Rashba localizada em certa região espacial. Foram consideradas diferentes configurações para a intensidade da interação de Rashba, potencial externo e campo magnético externo aplicado ao nanofio. Desse modo, compreendemos a modulação do transporte de spin quando esse é projetado na direção-z através da combinação da interação spin-órbita e das dimensionalidades do sistema.

Em particular, encontramos uma solução semi analítica capaz de determinar as propriedades de transporte dependente de spin. Essa semi analítica solução foi aplicada ao transporte eletrônico em um nanofio, considerando um modelo estritamente unidimensional e um modelo quase unidimensional usando a aproximação de massa efetiva (método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$). Neste caso, os elétrons confinados no um nanofio atravessam uma região onde o acoplamento spin-órbita está presente, o qual modificará sua transmissão. Em certas condições, a interação de Rashba causa uma supressão da transmissão para certas energias dos elétrons incidentes. Essa supressão pode ser compreendida através como sendo efeito do acoplamento de um estado ligado com os estados do contínuo. Esses resultados abrem uma nova perspectiva para o entendimento de resultados experimentais de transporte eletrônico em nanofios.

Palavras-chave: Nanoestruturas semicondutoras. Spintrônica. Acoplamento spin-órbita. Rashba. Nanofio.

Abstract

This work was dedicated to the theoretical study of semiconductor nanostructures aimed at the implementation of spin dependent electronic transport. The objective was to study the electron transport properties considering the Rashba spin-orbit interaction located in a certain spatial region. Different configurations were considered for the intensity of the Rashba interaction, external potential and external magnetic field applied to the nanowire. In this way, we understand the modulation of spin transport when it is projected in the z-direction through the combination of spin-orbit interaction and system dimensionalities.

In particular, we find a semi-analytical solution capable of determining spin dependent transport properties. This semi-analytic solution was applied to the electronic transport in a nanowire, considering a strictly one-dimensional model and a quasi one-dimensional model employing the effective mass approximation ($\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method). In this case, the electrons confined in a nanowire cross a region where the spin-orbit coupling is present, which will modify its transmission. Under certain conditions, the interaction of Rashba causes a suppression of the transmission for certain energies of the incident electrons. Such suppression can be understood as being the effect of coupling a bound state with the states of the continuum. These results open a new perspective for the understanding of experimental results of electronic transport in nanowires.

Keywords: Semiconductor nanostructures. Spintronics. Spin-orbit coupling. Rashba. Nanowire.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Imagem do nanofio utilizado por S. Heedt.	11
Figura 2 – Gráfico de condução observado por S. Heedt.	12
Figura 3 – Esquema de função envelope	19
Figura 4 – Esquema de barreira de potencial	23
Figura 5 – Esquema da solução de $\psi(x)$ para $E < V_0$	25
Figura 6 – Esquema do coeficiente de transmissão, \mathcal{P}_{tra} , em função de E/V	27
Figura 7 – Esquema de transporte unidimensional de Landauer.	28
Figura 8 – Esquema de nanofio com intervalo sob interação spin-órbita	31
Figura 9 – Transmissão para caso 1D com 1 canal, sem interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 0$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	40
Figura 10 – Transmissão para caso 1D com 1 canal, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).	41
Figura 11 – Transmissão para o caso 1D com 1 canal, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	42
Figura 12 – Transmissão para caso 1D com 1 canal, sem interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 0$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 2$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).	42
Figura 13 – Transmissão para caso 1D com 1 canal, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 2$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	43
Figura 14 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sem interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 0$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	44
Figura 15 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sem interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 0$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 1$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	45
Figura 16 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2\sqrt{2}$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 1$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).	46
Figura 17 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).	46
Figura 18 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	47
Figura 19 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 2$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	47

Figura 20 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 2$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$) com região reduzida ($L = 1$).	48
Figura 21 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 10 canais, sem interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 0$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	49
Figura 22 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 10 canais, sob interação spin-órbita, $\tilde{\gamma}_R = 3.7$, e potencial nulo, $\tilde{V}_0 = 0$, varrendo pontos até energia $\tilde{E} = 50$	50
Figura 23 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 10 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).	51
Figura 24 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).	51
Figura 25 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 3 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).	52
Figura 26 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 5 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).	52
Figura 27 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 10 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	53
Figura 28 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	54
Figura 29 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 3 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	54
Figura 30 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 5 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).	55

Sumário

1	INTRODUÇÃO	10
2	ESTRUTURA ELETRÔNICA DE SEMICONDUTORES	14
2.1	Método $k \cdot p$	14
2.2	Interação spin-órbita	16
2.3	Aproximação por função envelope	18
2.4	O Hamiltoniano de Rashba	21
3	MECANISMO DE TRANSPORTE	22
3.1	Tunelamento de barreira de potencial	22
3.2	Fórmula de Landauer	27
3.3	Caso de muitos canais	30
4	MODELO TEÓRICO	31
4.1	Interação spin-órbita de Rashba: Modelo 1D	32
4.2	Interação spin-órbita de Rashba: Modelo quase 1D	32
4.3	Método Semi-Analítico	36
5	RESULTADOS	39
5.1	Caso unidimensional	39
5.2	Caso quase unidimensional	49
6	CONCLUSÃO	56
	REFERÊNCIAS	58

1 Introdução

Desde a introdução do circuito integrado nos anos 1950 [1], que mostrou a possibilidade de utilizar dispositivos semicondutores, como transistores que substituíram as válvulas devido ao seu tamanho e preço de fabricação, cada vez mais empresas e pesquisadores se mostraram interessados nessa área. Devido aos inúmeros experimentos, o número de transistores individuais que podem ser colocados em um chip de circuito integrado único aumentou significativamente. Em 1980, a Hewlett-Packard produziu um único chip microprocessador contendo aproximadamente meio milhão de dispositivos em uma área de 1 cm^2 [2]. Atualmente, as áreas desses chips, variam de poucos milímetros quadrados para cerca de 3.5 cm^2 , com até 1 milhão de transistores. Claramente, esses dispositivos estão entrando em uma escala nanométrica, de forma que os componentes eletrônicos apresentam como principal característica as propriedades quânticas provenientes da sua escala de tamanho. Experimentalmente, diversas nanoestruturas podem ser fabricadas, tais como fios quânticos, pontos quânticos, pontos quânticos acoplados e anéis quânticos. O interesse nestas nanoestruturas semicondutoras advém da possibilidade de fabricação de diferentes dispositivos, pois sua forma, seu tamanho, sua estrutura de níveis e o número de elétrons confinados podem ser manipulados experimentalmente.

Utilizando a física nessa escala de tamanho é possível seguir uma abordagem alternativa para o controle dessas nanoestruturas: o estudo da área chamada spintrônica. Essa nova abordagem não depende somente da carga dos elétrons, mas também de seu spin. O spin pode ser visualizado como o elétron girando em torno de seu próprio eixo. De maneira mais específica, o spin é um segundo tipo de momento angular que aparece na mecânica quântica (sendo o primeiro o momento angular orbital) que pode ser medido como estados *up* ou *down*. Assim, a spintrônica, diferente da eletrônica usual, pode utilizar o spin do elétron como um grau de liberdade a mais na construção de dispositivos. Por exemplo, a Magnetoresistência Gigante vista por Albert Fert e Peter Grünberg em 1988 [3,4], conferindo a eles o prêmio Nobel em 2007 por terem conseguido usar o spin do elétron para aumentar a taxa na qual as informações podiam ser lidas de um disco rígido.

Para que esta eletrônica baseada em spin seja implementada, primeiramente é necessário a compreensão de como se dá o controle do grau de liberdade de spin em nanoestruturas semicondutoras. Em tais dispositivos é comum a utilização de acoplamento spin-órbita para obter um controle da rotação do spin na passagem de elétrons em certa região do espaço. O acoplamento spin-órbita pode ser considerado como um campo magnético efetivo "visto" pelo spin do elétron. Dessa forma, é fácil conceber que o acoplamento spin-órbita pode ser um meio natural e não magnético de criar uma corrente polarizada por spin. Utilizando, ainda, barreiras de potencial pode-se alcançar métodos de filtragem

de spin. Apesar das dificuldades práticas, foi aceito que, em dispositivos em nanoescala, a corrente de spin pode ser gerada em uma extremidade do dispositivo e detectado no outro [5,6]. O efeito combinado das barreiras e do acoplamento spin-órbita pode ser usado para obter uma função de transistor de spin [7,8]. A tensão elétrica é aplicada para alterar a força de acoplamento e assim modular o estado de spin dos elétrons de condução no canal semiconductor.

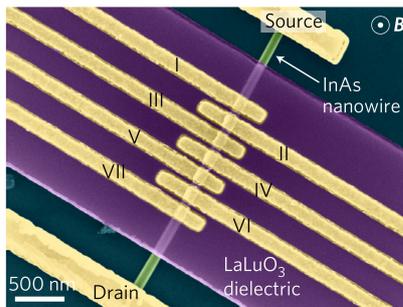
Um modelo já bem aceito e estudado para a interação spin-órbita foi apresentado por Emmanuel I. Rashba em conjunto com Valentin I. Sheka, em 1954, e posteriormente, em 1984, em conjunto com Yuri A. Bychkov [9], nomeado como efeito spin-órbita de Rashba. Esse efeito descreve, a partir de estudos de oscilação de campo magnético, uma degenerescência do spin (um certo nível de energia corresponde a dois estados de spin), representado pela interação do Hamiltoniano H_{SO} dado por

$$H_{SO} = \alpha (\mathbf{v} \times \mathbf{E}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.1)$$

onde α é a constante de Rashba, \mathbf{v} a velocidade do elétron, \mathbf{E} o campo elétrico aplicado e $\boldsymbol{\sigma}$ as matrizes de Pauli. O efeito Rashba, no sentido de gerar corrente de spin, é muito similar ao efeito Hall de spin, um fenômeno de transporte que consiste na acumulação de spin nas superfícies laterais de uma amostra que transporta corrente elétrica [10]. A principal diferença é que o efeito Rashba acontece na interface entre dois materiais diferentes, enquanto o efeito Hall acontece na estrutura de um material. Assim, um dispositivo multicamadas pode apresentar corrente de spin na estrutura e nas interfaces.

Recentemente em 2017, S. Heedt, em conjunto com um grupo de pesquisadores, conseguiu observar elementos de interação spin-órbita em medidas de condução [11]. Eles trataram um nanofio coberto por uma camada de dielétrico, controlando o número de canais a partir de voltagem aplicada, em presença de campo elétrico com variação de campo magnético (Figura 1). Neste artigo, a partir de previsões anteriores para nanofios

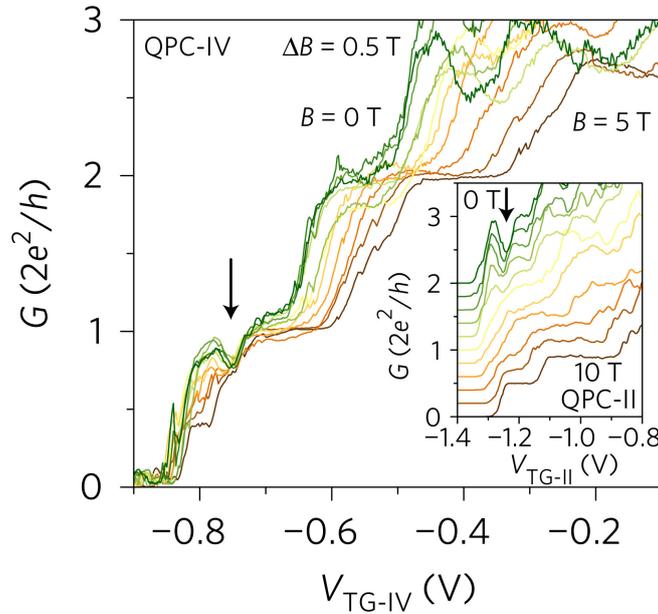
Figura 1 – Imagem do nanofio utilizado por S. Heedt.



semicondutores com acoplamento spin-órbita do tipo Rashba, mediram, experimentalmente, uma reentrância na condução já na menor sub-banda. Diferentemente das previsões

teóricas [12, 13], foi observado a reentrância na ausência de campo magnético externo (Figura 2). Nesse mesmo artigo, os autores propuseram um modelo bem complicado que envolve o espalhamento de duas partículas. Este trabalho nos leva a questionar se podemos

Figura 2 – Gráfico de condução observado por S. Heedt.



ver esses vales usando um modelo simplificado capaz de extrair a física básica desse fenômeno. Aqui nesta dissertação, portanto, estudamos de forma analítica e semi analítica o transporte e condução de elétrons através de uma região que possui interação spin-órbita, em específico o efeito de Rashba para sistemas unidimensionais e quase unidimensionais.

No Capítulo 2, vamos analisar de forma mais rigorosa a estrutura eletrônica de materiais. Para isso, será utilizada uma caracterização em função das bandas de energias. Esse cálculo de estrutura de banda, energia e estados de elétrons serão baseados na teoria de perturbação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e aproximação por função envelope, a qual recupera a Equação de Schrödinger com uma massa efetiva para o elétron. Já no Capítulo 3, vamos descrever a teoria básica do transporte de elétrons que atravessa uma certa região que causa espalhamento. Nessa região podemos considerar que haja um potencial constante, a interação spin-órbita, um campo magnético e suas combinações. Como estamos considerando um nanofio e o transporte de elétrons se dá em uma certa direção, o transporte pode ocorrer em diferentes canais (níveis de energia associados ao confinamento lateral do nanofio). Em especial, queremos ver como se dá a transmissão e reflexão de elétrons, a partir de certo número de canais permitidos, em função da energia total do sistema.

Por fim, nos Capítulos 4 e 5, iremos construir um método semi analítico para encontrar a função de onda que descreve os elétrons na região de acoplamento, assim

como encontrar as constantes de transmissão e reflexão dependentes de spin, em função da energia total do sistema. Com isso, vamos focar em identificar, para ambos os casos unidimensional e quase unidimensional, regiões onde há uma supressão na condução para diversos números de canais (sub-bandas) e como a condução se comporta quando mais canais são levados em conta no sistema.

2 Estrutura eletrônica de semicondutores

Como neste trabalho queremos analisar o transporte de spin em um nanofio semicondutor sob efeito de interação spin-órbita, primeiramente é interessante entender a estrutura eletrônica de sólidos. Para tal, é válido utilizar o teorema de Bloch [14] que descreve, em primeira aproximação, os estados dos elétrons na rede, afirmando que a energia dos auto-estados de um elétron em um cristal pode ser escrita como funções de Bloch, dadas por

$$\psi_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

onde \mathbf{r} é a posição, $u_{\nu,\mathbf{k}}$ é a função de onda periódica de mesma periodicidade que o cristal, ν o índice de banda e \mathbf{k} o vetor de onda.

Além disso, Luttinger e Kohn [15, 16] introduziram a teoria de perturbação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para analisar a estrutura da banda de valência, que usualmente é a banda totalmente ocupada de maior energia, para Ge e Si. Posteriormente Kane [17] estendeu o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para incluir as bandas de condução, isto é, banda seguinte da banda de valência que pode estar, no caso de metais, parcialmente ocupada. Iremos analisar o cálculo da banda em uma vizinhança dos pontos de simetria da zona de Brillouin e em seguida implementar a interação spin-órbita.

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

Para alcançar a descrição do sistema na representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ vamos começar utilizando o Hamiltoniano da rede,

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

onde, nessa equação, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ é o operador momento linear, V_0 é o potencial, que para a um cristal é uma função periódica de mesma periodicidade que a rede, e m_0 é massa de um elétron livre (sem presença de interação spin-órbita).

A partir da equação de Schrödinger [18] e utilizando as funções de Bloch, dada por

$$H_0\psi_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\nu}(\mathbf{k})\psi_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

encontramos, substituindo acima as Equações (2.1) e (2.2),

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\nu}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Pela atuação do operador \mathbf{p} sobre a parte de onda plana da função de onda de Bloch,

$$(-i\hbar\nabla)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hbar\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\nu,\mathbf{k}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(-i\hbar\nabla)u_{\nu,\mathbf{k}} \quad (2.5)$$

e

$$(-i\hbar\nabla)^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hbar^2 k^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\nu,\mathbf{k}} + 2\hbar\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (-i\hbar\nabla) u_{\nu,\mathbf{k}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (-i\hbar\nabla)^2 u_{\nu,\mathbf{k}}, \quad (2.6)$$

substituindo em (2.4), com a notação de momento, obtemos a equação de Schödinger na forma $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ dada por

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right) u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\nu}(\mathbf{k}) u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.7)$$

Podemos escrever o Hamiltoniano acima como a soma de dois termos,

$$H = H_0 + H_k, \quad (2.8)$$

sendo

$$H_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}, \quad (2.9)$$

como um elemento de perturbação, análogo a teoria de perturbação [19], proporcional a $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

É interessante notar que \mathbf{k} é um vetor que consiste de três números reais de unidades inversas ao comprimento, enquanto que \mathbf{p} é um vetor de operadores, isto é,

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} = k_x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) + k_y \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) + k_z \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (2.10)$$

Lembrando que o método visa o cálculo da estrutura de banda, $E_{\nu}(\mathbf{k})$, na vizinhança de pontos de simetria na zona de Brillouin, para semicondutores do tipo blenda de zinco, as formas cristalinas mais comuns de semicondutores octetos binários [20], os pontos importantes de simetria são localizados em $\mathbf{k} = 0$, ponto da primeira zona de Brillouin [21, 22]. A solução (funções de Bloch) para as proximidades desse ponto serão dadas por

$$u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu'} C_{\nu'}(\mathbf{k}) u_{\nu',\mathbf{0}}(\mathbf{r}). \quad (2.11)$$

Inserindo essa solução na Equação (2.7), utilizando um pouco de álgebra [22] e considerando $u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \nu, \mathbf{k} \rangle$, vamos multiplicar pelo complexo conjugado, $u_{\nu',\mathbf{0}}^*$ e integrar sobre a célula unitária, onde encontramos a matriz

$$\sum_{\nu'} \left[\left(E_{\nu,\mathbf{0}} - E_{\nu,\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \delta_{\nu,\nu'} \right) + \frac{\hbar}{2m_0} \mathbf{k} \cdot \langle \nu, 0 | \mathbf{p} | \nu', 0 \rangle \right] C_{\nu'}(\mathbf{k}) = 0. \quad (2.12)$$

Outra forma de encontrar a solução da Equação (2.7) se dá utilizando a teoria de perturbação não degenerada de segunda ordem [19], visto que estamos próximos do ponto $\mathbf{k} = 0$

e podemos tratar (2.9) como uma perturbação do Hamiltoniano inicial (2.2). Assim, a solução da Equação (2.7), até segunda ordem, é dada por

$$E_{\nu,\mathbf{k}} = E_{\nu,\mathbf{0}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{2m_0} \mathbf{k} \cdot \langle \nu, 0 | \mathbf{p} | \nu', 0 \rangle + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{|\mathbf{k} \cdot \langle \nu, 0 | \mathbf{p} | \nu', 0 \rangle|^2}{E_{\nu,\mathbf{0}} - E_{\nu',\mathbf{0}}} \quad (2.13)$$

Assim, como a banda de energia possui mínimo em $\mathbf{k} = 0$, o termo linear de \mathbf{k} é nulo, isto é

$$E_{\nu,\mathbf{k}} = E_{\nu,\mathbf{0}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{|\mathbf{k} \cdot \langle \nu, 0 | \mathbf{p} | \nu', 0 \rangle|^2}{E_{\nu,\mathbf{0}} - E_{\nu',\mathbf{0}}}. \quad (2.14)$$

Utilizando os índices de coordenadas cartesianas $\alpha, \beta = x, y, z$ [23], encontramos

$$E_{\nu,\mathbf{k}} = E_{\nu,\mathbf{0}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} k_\alpha k_\beta \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{\langle \nu, 0 | \mathbf{p}_\alpha | \nu', 0 \rangle \langle \nu, 0 | \mathbf{p}_\beta | \nu', 0 \rangle}{E_{\nu,\mathbf{0}} - E_{\nu',\mathbf{0}}}, \quad (2.15)$$

onde estamos somando sobre os índices α e β segundo a convenção de Einstein.

Utilizando o tensor de massa efetiva [23],

$$\left(\frac{1}{m_\nu} \right)_{\alpha,\beta} = \left(\frac{1}{m_0} \right) \delta_{\alpha,\beta} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{\langle \nu, 0 | \mathbf{p}_\alpha | \nu', 0 \rangle \langle \nu, 0 | \mathbf{p}_\beta | \nu', 0 \rangle}{E_{\nu,\mathbf{0}} - E_{\nu',\mathbf{0}}}, \quad (2.16)$$

por fim, então, podemos simplificar a solução (2.15) obtendo

$$E_{\nu,\mathbf{k}} = E_{\nu,\mathbf{0}} + \frac{\hbar^2}{2} k_\alpha k_\beta \left(\frac{1}{m_\nu} \right)_{\alpha,\beta}. \quad (2.17)$$

2.2 Interação spin-órbita

Agora, incluindo a interação spin-órbita de Pauli [21],

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \mathbf{p}, \quad (2.18)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ representa as matrizes de Pauli $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. Nossa Equação de Schrödinger (2.7), após aplicação do momento sobre as funções de Bloch, torna-se

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot (\hbar \mathbf{k} + \mathbf{p}) \right) u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\nu,\mathbf{k}} u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.19)$$

Utilizando a notação

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0), \quad (2.20)$$

obtemos

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \mathbf{p} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\nu,\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.21)$$

Onde, agora, os elementos de função de onda periódica de Bloch, $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, são *spinors* [24], que podemos representar por $|n, \mathbf{k}\rangle$, possuindo duas componentes. O índice n representa, ao mesmo tempo, o número de banda e o grau de liberdade do spin σ .

Para um vetor de onda fixo \mathbf{k}_0 , os conjuntos de funções periódicas de rede $\{|\nu, \mathbf{k}\rangle\}$ e $\{|n, \mathbf{k}\rangle\}$ apresentam uma base completa ortonormal [21] para as Equações (2.19) e (2.21), respectivamente. Dessa forma, podemos expandir os elementos $\{|n, \mathbf{k}\rangle\}$ em termos das funções de Bloch $\{|n, \mathbf{0}\rangle\}$, relacionados ao vetor de onda fixo \mathbf{k}_0 multiplicados pelos auto-estados de spin $|\sigma\rangle$, isto é,

$$|n, \mathbf{k}\rangle = \sum_{\nu', \sigma'} C_{n, \nu', \sigma'}(\mathbf{k}) |\nu', \sigma'\rangle, \quad (2.22)$$

onde $|\nu', \sigma'\rangle := |\nu', \mathbf{0}\rangle \otimes |\sigma'\rangle$, ou ainda,

$$u_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu', \sigma'} C_{n, \nu', \sigma'}(\mathbf{k}) u_{\nu', \sigma'}(\mathbf{r}). \quad (2.23)$$

Assim, de forma análoga ao realizado para obter a Equação (2.12), vamos multiplicar ambos os lados pelo complexo conjugado, isto é, aplicar $\langle \sigma, \nu |$, obtendo o Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ sob interação spin-órbita

$$\sum_{\nu', \sigma'} \left[\left(E_{\nu', \mathbf{0}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{\nu, \nu'} \delta_{\sigma, \sigma'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\nu, \nu'}_{\sigma, \sigma'} + \Delta_{\nu, \nu'}_{\sigma, \sigma'} \right] C_{n, \nu', \sigma'}(\mathbf{k}) = E_{n, \mathbf{k}} C_{n, \nu', \sigma'}(\mathbf{k}), \quad (2.24)$$

onde

$$E_{\nu', \mathbf{0}} \delta_{\nu, \nu'} \delta_{\sigma, \sigma'} = \langle \sigma, \nu | \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0 \right) | \nu', \sigma' \rangle \quad (2.25a)$$

$$\mathbf{P}_{\nu, \nu'}_{\sigma, \sigma'} = \langle \sigma, \nu | \boldsymbol{\pi} | \nu', \sigma' \rangle \quad (2.25b)$$

$$\Delta_{\nu, \nu'}_{\sigma, \sigma'} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle \sigma, \nu | \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times (\nabla V_0) | \nu', \sigma' \rangle \quad (2.25c)$$

Na Equação (2.24) os termos fora da diagonal $\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\nu, \nu'}_{\sigma, \sigma'}$ resultam numa mistura dos estados na banda de valência $|\nu, \mathbf{0}\rangle$ que se tornam mais fortes quanto maior \mathbf{k} e mais próximos da energia da banda de valência $E_\nu(\mathbf{0})$.

Em geral, os elementos de matriz da interação spin-órbita $\Delta_{\nu, \nu'}_{\sigma, \sigma'}$ resultam em uma divisão (*splitting*) dos níveis de energia degenerados $E_\nu(\mathbf{k})$ em $\mathbf{k} = 0$. Entretanto, precisa-se de uma análise mais cautelosa levando em conta as simetrias da banda. Por exemplo, sem levar em conta o spin, semicondutores como o GaAs (arsenieto de gálio) possuem três estados do tipo-p (momento angular orbital $l = 1$) degenerados [25]. Incluindo spin, a interação spin-órbita proporciona seis estados degenerados, com um total $j = 3/2$ de momento angular para estados BP (*buracos pesados*) e BL (*buracos leves*) [26]. Para banda de condução do tipo-s, os elementos são nulos.

A diagonalização da Equação (2.24) permite encontrar a relação de dispersão $E_n(\mathbf{k})$ e coeficientes de expansão $C_{n, \nu', \sigma'}(\mathbf{k})$ para todos os valores de \mathbf{k} e índice de banda n .

Entretanto queremos analisar apenas as bandas adjacentes, onde queremos saber a relação de dispersão $E_n(\mathbf{k})$ na vizinhança do ponto $\mathbf{k}_0 = 0$. Portanto, o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e a interação spi-órbita são levadas em consideração apenas para essas N bandas próximas, enquanto as contribuições das bandas remotas são consideradas por meios da teoria da perturbação de Löwdin [21, 23]. Essa abordagem resulta em um Hamiltoniano N -dimensional que possui termos extras de ordens elevadas de \mathbf{k} .

Restringindo a diagonalização de (2.24) para teoria de perturbação de segunda ordem, sem spin, encontramos

$$E_\nu(\mathbf{k}) = E_\nu(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\nu^*}, \quad (2.26)$$

onde

$$\frac{m_0}{m_\nu^*} = 1 + \frac{2}{m_0} \sum_{\nu'} \frac{P_{\nu,\nu'}^2}{E_\nu(\mathbf{0}) - E_{\nu'}(\mathbf{0})}. \quad (2.27)$$

Tal que a contribuição dominante na soma vem do acoplamento $P_{\nu,\nu'}$ da banda ν com a banda mais próxima ν' . Além disso, uma boa aproximação para a massa efetiva se dá por

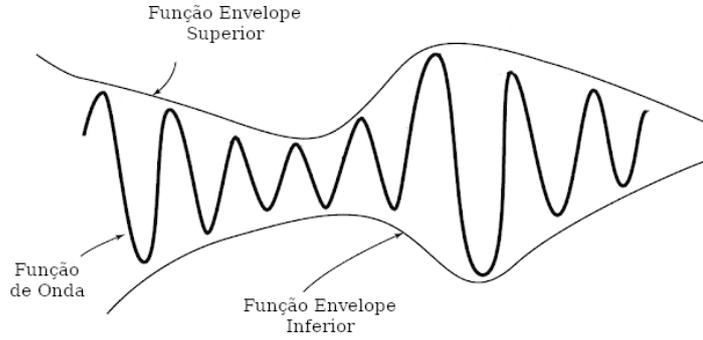
$$\frac{m_0}{m_{c/v}^*} \approx \frac{2}{m_0} \frac{P_{c,v}^2}{E_g}, \quad (2.28)$$

onde E_g é a abertura do nível de banda, m_c^* a massa efetiva para banda de condução e m_v^* a massa efetiva para banda de valência tal que é representada a fração entre elas por $m_{c/v}^*$.

2.3 Aproximação por função envelope

Até agora foram considerados cristais semicondutores periódicos perfeitos de tamanho infinito. Entretanto, nanoestruturas reais, além de terem tamanhos finitos, podem possuir várias composições e estarem sob presença de potenciais externos não uniformes. A aproximação por função envelope nos permite descrever estados de elétrons e buracos na presença desses campos externos, elétricos ou magnéticos, com variações na escala de tamanho da periodicidade da rede. Essas funções, de forma geral, são curvas contínuas delineando os extremos da função de onda que estamos envolvendo.

Figura 3 – Esquema de função envelope



Queremos explicar a aproximação por função envelope para o caso de semicondutor homogêneo na presença de potencial externo $V_{ext}(\mathbf{r})$. Aqui, a função de onda, $\psi(\mathbf{r})$, é escrita como uma superposição das funções de Bloch, $\psi_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, e as funções $F_{\nu}(\mathbf{r})$ que denotam as funções envelope, isto é,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} F_{\nu}(\mathbf{r})\psi_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.29)$$

Podemos, ainda, escrever a função de onda como a superposição de funções envelope para os elementos $u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ de Bloch. Pra isso, substituindo a Equação (2.1) em (2.29) e expandindo $F_{\nu}(\mathbf{r})$ em série de Fourier, alcançamos

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu,\mathbf{k}} f_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r})u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.30)$$

onde os coeficientes $f_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ são chamados de funções envelope, com ν o índice de onda e \mathbf{k} o vetor de onda, modulando as oscilações das funções de Bloch $u_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Essa modulação varia lentamente em relação à escala de comprimento da constante de rede, e por isso os coeficiente $f_{\nu,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ são chamados de função envelope [21].

Utilizando, agora, a Equação de Schrödinger, já com a interação spin-órbita, com um certo campo externo, temos

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \mathbf{p} + V_{ext}(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (2.31)$$

Análogo a derivação do modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, vamos expandir a função de onda $\psi(\mathbf{r})$ da Equação (2.30) em termos do ponto da primeira zona de Brillouin, $\mathbf{k} = 0$, e multiplicar pelos auto estados de spin $|\sigma\rangle$, isto é

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu,\sigma} f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r})u_{\nu,0}(\mathbf{r})|\sigma\rangle. \quad (2.32)$$

Substituindo a função de onda expandida (2.32) na Equação de Schödinger (2.31), multiplicando pelo complexo conjugado $u_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r})^*$ e integrando em uma célula unitária, encontramos o Hamiltoniano de multibanda, ou Hamiltoniano de função envelope,

$$\sum_{\nu',\sigma'} \left[\left(E_{\nu'}(\mathbf{0}) + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_{ext}(\mathbf{r}) \right) \delta_{\nu',\nu'} \delta_{\sigma,\sigma'} + \frac{1}{m_0} \mathbf{p} \cdot \mathbf{P}_{\nu,\nu'}_{\sigma,\sigma'} + \Delta_{\nu,\nu'}_{\sigma,\sigma'} \right] f_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) = E f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}), \quad (2.33)$$

ou apenas

$$\sum_{\nu',\sigma'} H_{\nu',\sigma'}^{FE} f_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) = E f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}), \quad (2.34)$$

com $\mathbf{P}_{\nu,\nu'}_{\sigma,\sigma'}$ e $\Delta_{\nu,\nu'}_{\sigma,\sigma'}$ dados, analogamente, às relações (2.25). Podemos notar, ainda, que o Hamiltoniano de função envelope $H_{\nu',\sigma'}^{FE}$ é praticamente idêntico ao Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ da Equação (2.24), onde o vetor de onda \mathbf{k} se torna o operador momento no Hamiltoniano de multibanda a partir da relação

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} = -i\nabla. \quad (2.35)$$

Utilizando a teoria de perturbação de segunda ordem de Löwdin para a estrutura de banda não degenerada, isotrópica e parabólica [21, 27], assim como a Equação (2.26), encontramos, para o operador momento na forma $-i\hbar\nabla$, o Hamiltoniano de massa efetiva,

$$H = \frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m_0^*} \right) \nabla + E_{\nu'}(\mathbf{0}) + V_{ext}(\mathbf{r}), \quad (2.36)$$

onde $E_{\nu'}(\mathbf{0})$, como anteriormente, é a energia da banda de condução no ponto de mínimo e m_0^* o tensor de massa efetiva dependente da posição a partir da interação do potencial externo $V_{ext}(\mathbf{r})$ [21].

Um exemplo interessante é utilizar um campo magnético alterando nossa Equação de Schrödinger (2.31) para

$$\left(\frac{(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}) + V(\mathbf{r}) + \frac{g_0}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (2.37)$$

onde \mathbf{A} é o potencial vetor, tal que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, $V(\mathbf{r})$ é um potencial escalar, g_0 é o fator g do elétron no vácuo e μ_B é o magneton de Bohr. Dessa forma, encontramos o Hamiltoniano de função envelope

$$\sum_{\nu',\sigma'} \left[\left(E_{\nu'}(\mathbf{0}) + \frac{(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right) \delta_{\nu,\nu'} \delta_{\sigma,\sigma'} + \frac{1}{m_0} (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}) \cdot \mathbf{P}_{\nu,\nu'}_{\sigma,\sigma'} + \Delta_{\nu,\nu'}_{\sigma,\sigma'} + \frac{g_0}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \delta_{\nu,\nu'} \right] f_{\nu',\sigma'}(\mathbf{r}) = E f_{\nu,\sigma}(\mathbf{r}), \quad (2.38)$$

com uma relação ao Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ (2.24) da forma

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} = -i\nabla + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \quad (2.39)$$

e Hamiltoniano de massa efetiva

$$H = \frac{(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m_\nu^*} + V(\mathbf{r}) + \frac{g_0^*}{2}\mu_B\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (2.40)$$

onde g_n^* é o fator giromagnético efetivo e m_n^* é a massa efetiva relativos a n -ésima-banda.

2.4 O Hamiltoniano de Rashba

O Hamiltoniano de Kane 8X8 descreve semicondutores diretos com estrutura blenda de zinco, onde o gap de menor energia entre as bandas de condução e de valência ocorre no ponto Γ . Esse Hamiltoniano além de incluir as bandas de condução Γ_6^c e de valência Γ_8^v também considera a banda de valência Γ_7^v chamada de split-off [21]. Considerando a teoria de perturbação de Löwdin e analisando os efeitos das bandas de valência na banda de condução é possível obter o Hamiltoniano de Rashba [21]:

$$H_{SO} = \alpha(\mathbf{v} \times \mathbf{E}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.41)$$

onde α é a constante de Rashba específica para cada semicondutor, \mathbf{v} é a velocidade do elétron e \mathbf{E} designa um campo elétrico externamente aplicado ao sistema. No caso em que o campo elétrico externo é diferente de zero, a eq.(2.41) deve ser adicionada à eq.(2.40) para incluir efeitos das bandas de valência Γ_8^v e Γ_7^v sobre a banda de condução Γ_6^c .

No Capítulo ??, iremos considerar diferentes valores para o campo magnético externo \mathbf{B} . No entanto, iremos usar o momento $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ [28] ao invés do momento canônico $\mathbf{p} - e\mathbf{A}$ e a contribuição dada pelo Hamiltoniano de Zeeman (último termo do lado direito da eq. 2.40), pois estamos no limite de campo magnético fraco. Já a interação spin-órbita será proporcional à $p_z\sigma_y$ no caso unidimensional e à $(\hat{k}_y\sigma_x - \hat{k}_x\sigma_y)$ no caso quase-unidimensional.

3 Mecanismo de transporte

Como já mencionado na introdução, várias estruturas eletrônicas na escala nanométrica já foram fabricadas e estudadas experimentalmente, como, por exemplo, uma fina camada de um material sobre outro, tal qual, AlGaAs e GaAs [11, 21]. Esse tipo de estrutura representa o que é chamado de confinamento quântico, isto é, quando a separação das superfícies de dois materiais é menor que o comprimento de onda do elétron, saindo do limite clássico para o quântico, tal que sua energia é quantizada.

Esse confinamento promove efeitos quânticos que podem ser estudados a partir de potenciais de espalhamento. Quando partículas atravessam regiões nas quais o meio está mudando em escalas de comprimento comparáveis ao comprimento de fase (comprimento de onda) das partículas ocorre uma interferência, ou melhor, a superposição de ondas incidentes e refletidas, análogo ao caso eletromagnético [29], nos leva a interferência construtiva e destrutiva. Essa superposição de estados promove a quantização do momento e energia, onde podemos usar os métodos do Capítulo 2. Entretanto, queremos observar, de forma geral, o transporte de partículas (elétrons) sobre essa região e como as amplitudes de reflexão e transmissão determinam o transporte.

3.1 Tunelamento de barreira de potencial

Vamos inicialmente estudar o fenômeno de partículas passando em uma região que apresenta uma barreira de potencial com intuito de comparação para o transporte sobre uma região de spin-órbita.

Esse fenômeno, conhecido como tunelamento quântico, sobre uma descrição de funções de onda, proporciona informação sobre a amplitude de probabilidade da posição, momento, e outros efeitos como transporte e espalhamento das partículas. Como estamos utilizando uma descrição probabilística, a natureza da partícula contradiz a Mecânica Clássica, onde ocorre a passagem da partícula através de uma barreira de potencial mesmo com uma energia menor.

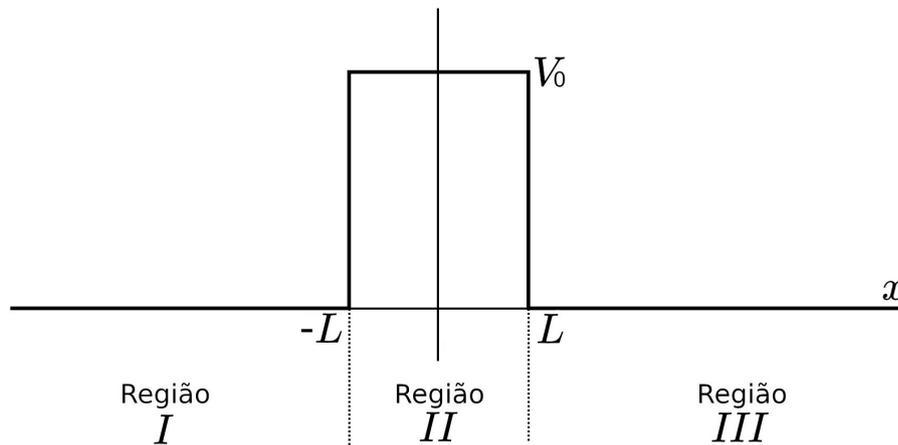
Para melhor ilustrar o fenômeno de tunelamento, vamos considerar uma bola rolando sobre uma superfície plana com certa energia cinética K . Ao encontrar elevação, tal como uma colina, a bola irá subir e passar a elevação somente se sua energia cinética K for superior que a energia potencial do topo da colina U . Nesse caso, sua probabilidade de atravessar a colina é exatamente 1. Se, por outro lado, sua energia cinética for menor que o potencial no topo da colina, a bola irá alcançar uma certa altura sobre a encosta, irá parar nesse ponto de máximo e depois irá rolar na direção oposta, conservando sua

energia total. Nesse caso, sua probabilidade de atravessar a colina é exatamente 0 e de retornar (ser refletida) é exatamente 1. Entretanto, de acordo com a Mecânica Quântica, a bola possui uma função de onda que é definida sobre todo o espaço. Essa função de onda pode ser até bem localizada, mas existe a chance da bola atravessar a colina.

Vamos caracterizar o transporte, unidimensional, utilizando um barreira de potencial quadrada separando o espaço em três regiões, conforme ilustrado na Figura 4, tal que,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < -L \\ V_0 & \text{se } -L \leq x \leq L \\ 0 & \text{se } x > L \end{cases} \quad (3.1)$$

Figura 4 – Esquema de barreira de potencial



Barreira de potencial de altura V_0 criando três regiões com diferentes funções de onda. Na região *I* teremos uma onda incidente e uma refletida, na região *II* uma parte da onda incidente é transmitida e atravessa para região *III* que continua a se propagar.

Para o caso onde L e V_0 são finitos, possibilitando que uma parte da onda incidente, vinda da esquerda, possa penetrar a barreira e atravessar toda região de potencial até ser propagada. O quanto de onda incidente será possível atravessar a barreira irá depender da altura V_0 , do comprimento da região de potencial L e da energia E da partícula incidente na barreira. Esse problema se resume em resolver a equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad \text{para } -\infty < x < +\infty, \quad (3.2)$$

onde, sabendo a energia E da partícula, vamos utilizar uma função de onda $\psi(x)$ que seja contínua e possua derivada contínua para todo x . Ou melhor, estamos procurando uma solução que nos retorne uma interpretação probabilística da forma $|\psi(x)|^2 = \psi^*\psi$.

Dividindo o eixo x em três regiões, dadas pelo potencial (Figura 4), encontramos três equações para diferentes funções de onda, sendo denotado $\psi_I(x)$ a solução para região I, onde $x < -L$, $\psi_{II}(x)$ para região II, onde $-L \leq x \leq L$, e ψ_{III} para região III, onde $x > L$, tal que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} = E\psi_I(x), \quad \text{para região I: } -\infty < x < -L; \quad (3.3a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi_{II}(x), \quad \text{para região II: } -L < x < L; \quad (3.3b)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} = E\psi_{III}(x), \quad \text{para região III: } L < x < +\infty. \quad (3.3c)$$

Podemos verificar facilmente, por substituição, que as soluções para as regiões sem potencial, região I e II, são dadas por

$$\psi_I(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} \quad (3.4a)$$

$$\psi_{III}(x) = Fe^{+ikx} + Ge^{-ikx}, \quad (3.4b)$$

onde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ é a frente de onda e A , B , F e G são constantes, da forma que A representa a amplitude de onda incidente, B a onda refletida em $-L$ pela barreira de potencial, F a onda propagada a partir de L que atravessou a barreira e G , que será nula, já que não temos onda refletida (propagante na direção $-x$) depois da barreira. Além disso, podemos escrever de forma explicita a onda incidente, refletida e transmitida,

$$\psi_{in}(x) = Ae^{+ikx} \quad (3.5a)$$

$$\psi_{ref}(x) = Be^{-ikx} \quad (3.5b)$$

$$\psi_{tra}(x) = Fe^{+ikx}, \quad (3.5c)$$

da forma que podemos encontrar o quadrado dos seus coeficientes a partir da probabilidade, ou intensidade de onda,

$$|\psi_{in}(x)|^2 = \psi_{in}^*(x)\psi_{in}(x) = (Ae^{+ikx})^*Ae^{+ikx} = A^*e^{-ikx}Ae^{+ikx} = A^*A = |A|^2, \quad (3.6)$$

analogamente,

$$|\psi_{ref}(x)|^2 = |B|^2 \quad (3.7a)$$

$$|\psi_{tra}(x)|^2 = |F|^2. \quad (3.7b)$$

Assim, a probabilidade de transmissão, ou probabilidade de tunelamento, será dada pela razão da intensidade de transmissão pela intensidade de incidência

$$\mathcal{P}_{tra}(L, E) = \frac{|\psi_{tra}(x)|^2}{|\psi_{in}(x)|^2} = \frac{|F|^2}{|A|^2}. \quad (3.8)$$

Como mencionado, a solução do problema depende diretamente do valor fixo da energia E e na região II do valor do potencial V_0 , portanto precisamos separar o problema em dois casos: energia menor que a altura da barreira, $E < V_0$, e energia maior que altura da barreira, $E > V_0$, além do limite, que pode ser aplicado a qualquer um dos dois casos, onde a energia se aproxima dessa altura V_0 .

Para o primeiro caso, podemos reorganizar a Equação (3.3b),

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} = \beta^2\psi_{II}(x), \quad (3.9)$$

onde aqui, β^2 é uma constante positiva, já que $E < V_0$, e portanto β é um número real,

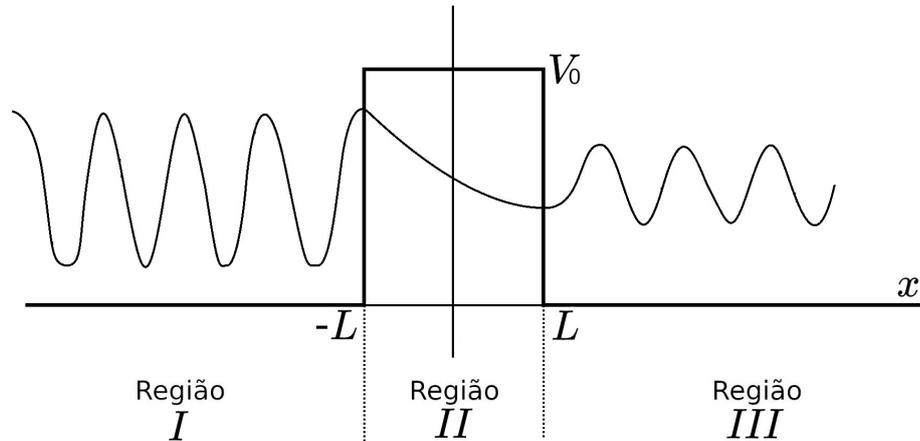
$$\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0. \quad (3.10)$$

Dessa forma a solução da Equação (3.17) será dada por

$$\psi_{II}(x) = Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, \quad (3.11)$$

que diferente das soluções nas regiões sem potencial I e III, dadas por oscilações (Equações (3.4a) e (3.4b)), na região II encontramos uma expressão na forma de exponencial que descreve uma atenuação gradual [18].

Figura 5 – Esquema da solução de $\psi(x)$ para $E < V_0$



No esquema de barreira de potencial temos na região I e III a solução da Equação (3.17) descrita por uma oscilação e na região II por uma exponencial.

Utilizando as condições de contorno que, como mencionado, a função deve ser contínua nas interfaces,

$$\psi_I(-L) = \psi_{II}(-L) \quad (3.12a)$$

$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L), \quad (3.12b)$$

e também deve ter derivas contínuas nas interface,

$$\left. \frac{d\psi_I(x)}{dx} \right|_{x=-L} = \left. \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=-L} \quad (3.13a)$$

$$\left. \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=L} = \left. \frac{d\psi_{III}(x)}{dx} \right|_{x=L}, \quad (3.13b)$$

encontramos quatro equações com cinco incógnitas (A , B , C , D e F). Entretanto, como queremos encontrar a probabilidade de transmissão, dada pela Equação (3.8), podemos expressar o coeficiente F , da onda transmitida, em função de A , tal que,

$$\frac{F}{A} = \frac{e^{-ikL}}{\cosh(\beta L) + i(\gamma/2) \sinh(\beta L)}, \quad (3.14)$$

onde $\gamma = (\beta^2 - k^2)/\beta k$. Assim, utilizando a relação de probabilidade de transmissão, encontramos

$$\mathcal{P}_{tra}(E < V_0) = \frac{1}{\cosh^2(\beta L) + (\gamma/2)^2 \sinh^2(\beta L)}, \quad (3.15)$$

ou ainda

$$\frac{1}{\mathcal{P}_{tra}(E < V_0)} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \sinh^2(2\beta L). \quad (3.16)$$

De forma análoga, para o segundo caso ($E > V_0$) podemos rearranjar a Equação (3.3b) da forma

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} = -\alpha^2\psi_{II}(x), \quad (3.17)$$

onde aqui, α^2 é uma constante positiva dada por

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0), \quad (3.18)$$

resultando, diferente do caso anterior, em uma solução da forma oscilante para região II,

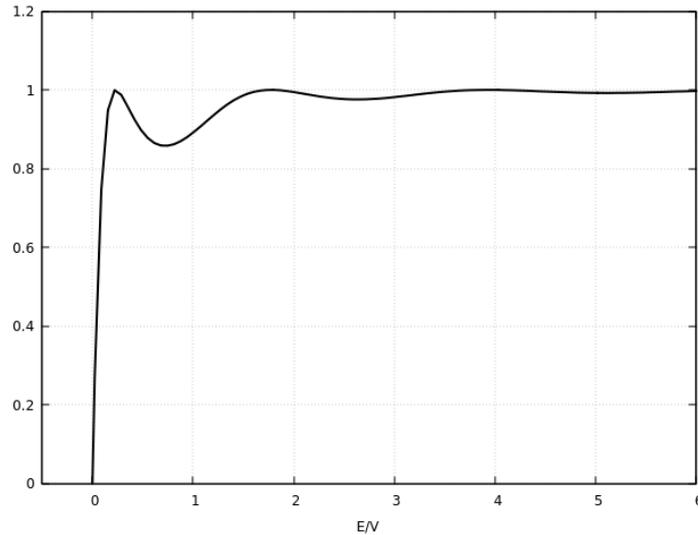
$$\psi_{II}(x) = Ce^{-i\alpha x} + De^{+i\alpha x}. \quad (3.19)$$

Utilizando, novamente, as condições de contorno, encontramos o coeficiente da onda de transmissão em função do coeficiente da onda incidente, alcançando a relação de probabilidade de transmissão

$$\frac{1}{\mathcal{P}_{tra}(E > V_0)} = 1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(E - V_0)} \sinh^2(2\alpha L). \quad (3.20)$$

A partir das Equações (3.16) e (3.20), vemos que a transmissão será máxima quando o seno hiperbólico for máximo, isto é, $2\beta L = n\pi$ e $2\alpha L = n\pi$, respectivamente. Essa é uma condição equivalente a dizer que $n\lambda = L$, onde λ é comprimento de onda do elétron na região da barreira [30].

Figura 6 – Esquema do coeficiente de transmissão, \mathcal{P}_{tra} , em função de E/V



Podemos, ainda, encontrar, de forma análoga, a probabilidade de transmissão para o caso de um poço de potencial. Aqui basta tomar um valor negativo para o potencial V_0 e separar os casos para energias inferior e superior que esse potencial.

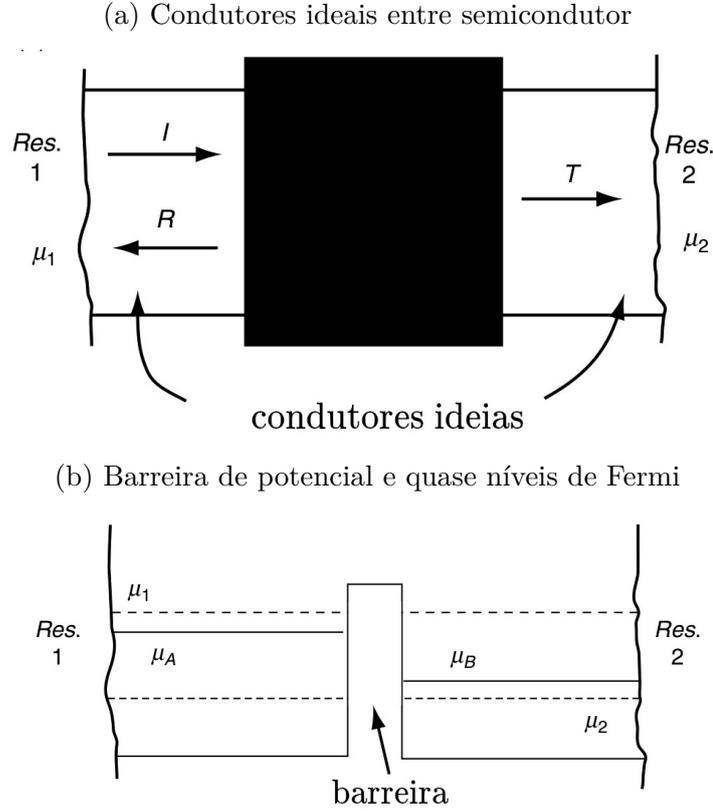
3.2 Fórmula de Landauer

Vimos na primeira seção deste capítulo transporte quântico através do estudo de tunelamento de barreira de potencial. Vamos estender esses conceitos para uma estrutura geométrica um pouco mais complicada, no sentido que queremos, agora, descrever a transmissão de elétrons, ou transporte de corrente, e não apenas sua probabilidade de tunelamento. Para isso, generalizando nosso tratamento, vamos utilizar o formalismo de Landauer [31, 32], onde agora se tornou padrão na linguagem do transporte de nanoestruturas [21], que depende da estrutura de banda e na geometria do sistema.

Inicialmente, vamos considerar um problema unidimensional de barreira de potencial (que pode ser dada por um semicondutor) da forma que a barreira é conectada a condutores unidimensionais ideais, e idênticos, que por sua vez se conectam a reservatórios de elétrons

(Figura 7). Devemos lembrar que um condutor unidimensional ideal é dado por um nanofio em um limite quântico onde apenas uma sub-banda é ocupada.

Figura 7 – Esquema de transporte unidimensional de Landauer.



O reservatório da esquerda (Res. 1) injeta elétrons no condutor ideal com uma quase energia de Fermi μ_1 e o reservatório da direita (Res. 2) emite elétrons com uma quase energia de Fermi μ_2 (Figura 7b). Para um sistema unidimensional ideal, com pequenos desvios de um estado estacionário, a corrente para os condutores da esquerda e direita pode ser escrita como uma integral sobre o fluxo [21]

$$I = \frac{2e}{2\pi} \left[\int_0^\infty \nu(k) f_1(k) T(E) dk - \int_0^\infty \nu(k') f_2(k') T(E') dk' \right], \quad (3.21)$$

onde $\frac{2e}{2\pi}$ é a constante dada pela densidade de estados no espaço k , $\nu(k)$ a velocidade de grupo do elétron, $T(E)$ é o coeficiente de transmissão e f_1 e f_2 são funções de distribuição de Fermi dos reservatórios caracterizadas pelas energias de Fermi, isto é,

$$f_i(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu_i)/k_B T} + 1} \quad (3.22)$$

Fazendo uma mudança de variável e integrando sobre a energia,

$$I = \frac{e}{\pi} \left[\int_0^{\mu_1} \nu(k) f_1(k) T(E) \left(\frac{dk}{dE} \right) dE - \int_0^{\mu_2} \nu(k') f_2(k') T(E') \left(\frac{dk'}{dE} \right) dE \right], \quad (3.23)$$

da forma que, como desenvolvido em [33], para um sistema onde a temperatura está próxima de zero, de maneira que é tratado um processo não dissipativo para a transmissão,

$$I = \frac{e}{\pi\hbar} \int_{\mu_2}^{\mu_1} T(E) dE. \quad (3.24)$$

Assumindo, agora, que a voltagem aplicada é pequena, isto é, um regime linear [32], então a dependência da energia na transmissão $T(E)$ pode ser descartada, da forma que a corrente se torna proporcional à diferença de quase níveis de Fermi,

$$I = \frac{e}{\pi\hbar} T(\mu_1 - \mu_2). \quad (3.25)$$

Precisamos agora encontrar uma relação dos quase níveis de Fermi, com os níveis de Fermi dados pela diferença de potencial entre os condutores. Para isso, podemos integrar a densidade de elétrons dos condutores ideais. Para o condutor da esquerda temos

$$n_a = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f_a(E) dk = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [(2 - T)f_1(E) + Tf_2(E)] dk, \quad (3.26)$$

onde $f_a(E)$ representa a função de distribuição perto do equilíbrio, caracterizada pela energia de Fermi μ_A , e com relação de distribuição (já simplificada) de $f_a = f_1 + Rf_1 + Tf_2$ [32]. De forma análoga, encontramos a densidade de elétrons do condutor a direita como

$$n_b = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f_b(E) dk = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [(2 - T)f_2(E) + Tf_1(E)] dk, \quad (3.27)$$

com relação de distribuição agora de $f_b = f_2 + Rf_2 + Tf_1$ [32]. Para o limite de baixa temperatura [32], subtraindo a densidade n_b de n_a , temos

$$2 \int_{\mu_B}^{\mu_A} \left(\frac{dk}{dE} \right) dE = \int_{\mu_2}^{\mu_1} (2 - T) \left(\frac{dk}{dE} \right) dE - \int_{\mu_2}^{\mu_1} T \left(\frac{dk}{dE} \right) dE. \quad (3.28)$$

Assumindo, agora, que a diferença entre as energias de Fermi é suficientemente pequena, da forma que podemos, novamente, descartar a dependência da energia na transmissão e da função inversa da velocidade $\frac{dk}{dE}$, simplificamos a Equação (3.28) para uma diferença das energias de Fermi,

$$\mu_A - \mu_B = (1 - T)(\mu_1 - \mu_2), \quad (3.29)$$

relacionada com a diferença das quase energias de Fermi iniciais.

Por fim, podemos encontrar a relação de condutância,

$$G = \frac{I}{V}, \quad (3.30)$$

utilizando as Equações (3.25), (3.29) e a relação de diferença de potencia $eV = \mu_A - \mu_B$, tal que

$$G = \frac{2e^2}{h} \left(\frac{T}{1 - T} \right) = \frac{2e^2 T}{h R}, \quad (3.31)$$

conhecida como fórmula de Landauer para um único canal.

3.3 Caso de muitos canais

Vimos na seção anterior o transporte para o caso de apenas um canal. Vamos, agora, para o caso em que múltiplos canais de condução estão presentes. Esse caso corresponde a situação na qual um número N de sub-bandas são preenchidas com a energia de Fermi e cada uma contribui para a corrente. Podemos escrever as soluções, para o condutor da esquerda e da direita, respectivamente, como

$$\psi_i^I(\mathbf{r}, z) = \sum_{j=1}^N (A_j e^{ik_{j,z}z} + B_j e^{-ik_{j,z}z}) \varphi_j(\mathbf{r}) \quad (3.32)$$

e

$$\psi_n^{III}(\mathbf{r}, z) = \sum_{j=1}^{N'} (C_j e^{ik_{j,z}z} + D_j e^{-ik_{j,z}z}) \varphi_j(\mathbf{r}), \quad (3.33)$$

onde, \mathbf{r} representa a posição do vetor na direção transversal, j índice de solução transversal, $k_{j,z}$ o vetor de onda correspondente ao modo (sub-banda) e os índices i e n indicam a condução particular de cada modo.

Nessa situação, uma onda incidente de modo i possui probabilidade $T_{ji} = |t_{ji}|^2$ de ser transmitida no modo j para direita e probabilidade $R_{ji} = |r_{ji}|^2$ de ser refletida. Para um modo j particular no lado esquerdo, a corrente injetada no canal i no lado direito entre μ_2 e μ_1 será, assim como o caso de um único canal, independente da velocidade. Assumindo, também, que temos o mesmo número de canais em cada lado, a corrente total do modo i , assim como na Equação 3.25, será dada por

$$I_i = \frac{e}{\pi\hbar} \sum_{j=1}^N T_{ji} (\mu_1 - \mu_2) = \frac{e}{\pi\hbar} T_i (\mu_1 - \mu_2), \quad (3.34)$$

com relação de transmissão e reflexão da forma

$$\sum_{i=1}^N T_i = \sum_{i=1}^N (1 - R_i). \quad (3.35)$$

De forma similar aos cálculos realizados na seção anterior, como melhor descrito em [34], podemos encontrar a diferença de potencial, com relação as energias de Fermi, como

$$eV = \mu_A - \mu_B = \left(\frac{\mu_1 - \mu_2}{2} \right) \frac{\sum_{i=1}^N (1 + R_i - T_i) \nu_i^{-1}}{\sum_{i=1}^N \nu_i^{-1}} \quad (3.36)$$

e a condução como

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{i=1}^N T_i \frac{2 \sum_{i=1}^N \nu_i^{-1}}{\sum_{i=1}^N (1 + R_i - T_i) \nu_i^{-1}}, \quad (3.37)$$

Se uma medição for realizada em dois terminais a condutância se reduz à

$$G_{2Term} = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{i=1}^N T_i = \frac{e^2}{\pi\hbar} Tr(tt^\dagger) \quad (3.38)$$

Através da eq.3.38 podemos notar que a condutância é diretamente proporcional à probabilidade de transmissão. Desse modo, no Capítulo 5, nós iremos apresentar os resultados em termos da transmissão e da reflexão.

4 Modelo teórico

O problema que estamos interessados, como já mencionado, é o transporte de spin e condução de elétrons em um nanofio, onde a interação spin-órbita ocorre em certa região do espaço devido à aplicação de uma campo elétrico externo. Vamos considerar casos com e sem campo magnético externo \mathbf{B} local e analisar de forma semi-analítica o transporte eletrônico em função da energia total.

Figura 8 – Esquema de nanofio com intervalo sob interação spin-órbita



Elétrons vindo da região 1 dada por um condutor ideal, incidindo em $-L$, atravessando a região 2 que possui interação spin-órbita e sendo transmitidos, em L , para região 3, também dada por um condutor ideal.

Conforme a Figura 8, separamos o nanofio em 3 regiões. Os elétrons vem da região 1 (seguindo pelo eixo z de $-\infty$ a $+\infty$) dada por um condutor ideal. Ao alcançarem a posição $z = -L$, uma parte dos elétrons é refletida, análogo ao caso de barreira de potencial, e outra parte passa para região 2 que possui interação spin-órbita. Em seguida alcançam a posição $z = L$ onde uma terceira parcela de elétrons são transmitidos para região 3, dada por um condutor ideal.

Para região 1 e 3 o sistema é descrito pelo Hamiltoniano H_0 , com termos de energia cinética e potencial,

$$H_0 = \frac{|\mathbf{p}^2|}{2m^*} + V(\mathbf{r}), \quad (4.1)$$

onde \mathbf{p} é momento do elétron e m^* a sua massa efetiva. Enquanto que para região 2, devemos acrescentar o termo de spin-órbita e campo magnético local (que atua somente nesta região). Para tratar o nanofio juntamente com os efeitos que devem ser incluídos na região 2, nós iremos usar duas abordagens. A primeira assume um modelo estritamente unidimensional para o nanofio e a outra considera o confinamento lateral e suas consequências para o transporte eletrônico.

4.1 Interação spin-órbita de Rashba: Modelo 1D

O sistema mais simples que podemos pensar inicialmente para incluir a interação de Rashba é o caso unidimensional [28]. Aqui, para a região 2, além da contribuição H_0 , teremos a contribuição de Rashba dada por:

$$H_R = -\gamma_R p_z \sigma_y, \quad (4.2)$$

onde γ_R representa a força efetiva do campo de Rashba [28], p_z o momento na direção de propagação e σ_y é uma das matrizes de Pauli. Dessa forma o Hamiltoniano na região 2 será dado por

$$H = \frac{|\mathbf{p}^2|}{2m^*} - \gamma_R p_z \sigma_y + V(\mathbf{r}) \quad (4.3)$$

A partir da Equação de Schrödinger, $H\Psi = E\Psi$, e utilizando a seguinte função de onda,

$$\Psi = e^{-ikz} \begin{pmatrix} \psi^+ \\ \psi^- \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

alcançamos um sistema da forma

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 + V(\mathbf{r}) - E & i\gamma_R \hbar k \\ -i\gamma_R \hbar k & \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 + V(\mathbf{r}) - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^+ \\ \psi^- \end{pmatrix} = 0, \quad (4.5)$$

onde ψ^+ e ψ^- representam as parte da frente de onda do elétron com spin *up* e spin *down*, respectivamente. Aqui, podemos identificar que o sistema mostra a transmissão do elétron em função da interação de Rashba (elementos fora da diagonal principal) que pode alterar, justamente, o seu spin. Além disso, podemos tomar um potencial do tipo degrau, $V(\mathbf{r}) = V_0$ que atua somente na região 2, como visto na Seção 3.1, de forma a facilitar as contas. A contribuição gerada pelo efeito Zeeman é

$$H_Z = \gamma_Z \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (4.6)$$

onde γ_Z representa o coeficiente de Zeeman de divisão de energia, em unidade de energia por campo, \mathbf{B} o campo magnético aplicado e $\boldsymbol{\sigma}$ as matrizes de Pauli. Tomando, então, um campo magnético na direção x (perpendicular a propagação), obtemos as seguintes equações para a região 2:

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 + V_0 - E & i\gamma_R \hbar k + \gamma_Z B \\ -i\gamma_R \hbar k + \gamma_Z B & \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 + V_0 - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^+ \\ \psi^- \end{pmatrix} = 0, \quad (4.7)$$

4.2 Interação spin-órbita de Rashba: Modelo quase 1D

Nossa abordagem, agora, será utilizar um sistema quase unidimensional. Isto é, vamos tomar um geometria na qual o nanofio se trata de um cilindro perfeito. Isso nos permite tratar de forma separada as energias da parte transversal e longitudinal do fio.

Além disso, teremos aqui um potencial $V(\mathbf{r})$ descrito com duas contribuições: potencial de confinamento e potencial devido ao campo elétrico da corrente na direção de propagação z ,

$$V(\mathbf{r}) = V_{\text{conf}}(\mathbf{r}) + V_E(z), \quad (4.8)$$

Para o potencial de confinamento, os elétrons serão mantidos dentro do fio a partir de simetria radial (independente de z), ou melhor,

$$V_{\text{conf}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{se } |\rho| \leq a \\ \infty & \text{se } |\rho| > a \end{cases}, \quad (4.9)$$

onde ρ é a componente radial e a o raio do nanofio. Já o potencial devido ao campo elétrico $V_E(z)$, será interessante, para o cálculo da interação spin-órbita de Rashba e pode ser descartado em alguns casos para obtenção da solução da função de onda. Dai, então, a necessidade de uma análise analítica ou numérica sobre o sistema.

Com isso, para região 2 o sistema é dado por um Hamiltoniano que possui a contribuição H_0 e contribuição da interação spin-órbita de Rashba,

$$H = H_0 + H_R \quad (4.10)$$

tal que o termo de Rashba, utilizando o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, é dado por

$$H_R = \alpha(\mathbf{k} \times \nabla V(\mathbf{r})) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (4.11)$$

onde \mathbf{k} é o vetor de frente de onda, $\boldsymbol{\sigma}$ as matrizes de Pauli e α a constante de acoplamento dada pelo material e o momento magnético do elétron. Substituindo o potencial (4.8), e tomando um potencial elétrico dado por

$$V_E(z) = V_0 - eFz. \quad (4.12)$$

onde V_0 é um potencial escalar fixo, e é a carga do elétron, F o módulo da força elétrica e z o eixo de propagação, encontramos

$$\begin{aligned} H_R &= -\alpha e F (\mathbf{k} \times \hat{z}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= -\alpha e F (\hat{k}_y \sigma_x - \hat{k}_x \sigma_y) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Utilizando as relações de k e σ ,

$$\hat{k}_{\pm} = \hat{k}_x \pm i\hat{k}_y \quad (4.14)$$

e

$$\sigma_{\pm} = \frac{\sigma_x \pm i\sigma_y}{2} \quad (4.15)$$

encontramos o Hamiltoniano de interação spin-órbita de Rashba como

$$H_R = -i\alpha e F (\hat{k}_+ \sigma_- - \hat{k}_- \sigma_+) \quad (4.16)$$

Dessa forma, nosso Hamiltoniano total, substituindo a relação do momento, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, para cada coordenada, explicitando o termo em z , é dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho) + V(z) - i\alpha e F (\hat{k}_+ \sigma_- - \hat{k}_- \sigma_+) \quad (4.17)$$

Como estamos analisando um nanofio que se trata de um cilindro perfeito, podemos utilizar esse sistema de coordenadas, parametrizando o sistema, da forma que

$$\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (4.18)$$

e

$$\hat{k}_{\pm} = -ie^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \pm \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (4.19)$$

Substituindo as relações (4.18) e (4.19) em (4.17), encontramos uma equação diferencial onde podemos utilizar o método de separações de variáveis [35]. Ou melhor, podemos analisar apenas a parte transversal,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\perp}^2 f = E_{\perp} f \quad \text{para } |\rho| \leq R \quad (4.20)$$

que possui dada por [35]

$$f_{n,m}(\rho, \phi) = A_{n,m} J_n \left(\frac{\mu_{n,m} \rho}{a} \right) e^{in\phi}, \quad \text{para } \begin{array}{l} n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ m = 1, 2, \dots \end{array} \quad (4.21)$$

onde J_n são as funções de Bessel de ordem n , $\mu_{n,m}$ é o m -ésimo zero da n -ésima função de Bessel, a o raio do fio e $A_{n,m}$ são os respectivos coeficientes. Encontrando, também, as energias

$$E_{\perp}^{n,m} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\mu_{n,m}^2}{a^2}. \quad (4.22)$$

Dessa forma, utilizando a solução da parte transversal, podemos rescrever a equação de onda, pelo método de separação de variáveis, como

$$\Psi = \sum_{n,m} f_{n,m}(\rho, \phi) \begin{pmatrix} \psi_{n,m}^+(z) \\ \psi_{n,m}^-(z) \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

onde o vetor a direita, $\psi_{n,m}^{\pm}$, representa um *spinor*, separando a equação de onda para spin *up* e spin *down*. Retornando ao Hamiltoniano total, Equação (4.17), aplicado na Equação de Schrodinger,

$$\left(E_{\perp}^{n,m} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) - i\alpha e F (\hat{k}_+ \sigma_- - \hat{k}_- \sigma_+) \right) \Psi = E \Psi, \quad (4.24)$$

substituindo a Equação de onda (4.23), temos

$$\sum_s \left\{ \left(E_{\perp}^{n,m} - E - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right) \delta_{s',s} \begin{pmatrix} \psi_s^+(z) \\ \psi_s^-(z) \end{pmatrix} - i\alpha e F \begin{pmatrix} 0 & -\langle s' | \hat{k}_- | s \rangle \\ \langle s' | \hat{k}_+ | s \rangle & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_s^+(z) \\ \psi_s^-(z) \end{pmatrix} \right\} = 0, \quad (4.25)$$

onde os índices s e s' são dados pelos pares de números quânticos n, m e n', m' , respectivamente, e as relações de \hat{k}_{\pm} são dadas por

$$\langle s' | \hat{k}_{\pm} | s \rangle = \frac{2i}{a} T_{s'}^s \delta_{n', n \mp 1} \quad (4.26)$$

sendo

$$T_{s'}^s = \frac{\mu_s / \mu_{s'}}{(\mu_s / \mu_{s'})^2 - 1}. \quad (4.27)$$

Utilizando ainda, em unidades de energia, a relação $E = E_{\perp}^s + \frac{\hbar^2 k_s^2}{2m^*}$, encontramos a partir da Equação (4.25) o Hamiltoniano

$$H_{s,s'} = \begin{pmatrix} \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) - \frac{\hbar^2 k_s^2}{2m^*} \right) \delta_{s,s'} & i\alpha e F \frac{2i}{a} T_{s'}^s \delta_{n', n+1} \\ -i\alpha e F \frac{2i}{a} T_{s'}^s \delta_{n', n-1} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) - \frac{\hbar^2 k_{s'}^2}{2m^*} \right) \delta_{s,s'} \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

ou simplesmente, em unidades reduzidas,

$$\tilde{H}_{s,s'} = \frac{H_{s,s'}}{\epsilon_0} = \begin{pmatrix} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + \tilde{V}(\tilde{z}) - \tilde{k}_s^2 \right) \delta_{s,s'} & -2\tilde{\gamma} T_{s'}^s \delta_{n', n+1} \\ 2\tilde{\gamma} T_{s'}^s \delta_{n', n-1} & \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + \tilde{V}(\tilde{z}) - \tilde{k}_{s'}^2 \right) \delta_{s,s'} \end{pmatrix}, \quad (4.29)$$

onde utilizamos

$$\epsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2m^* a^2} \quad (4.30a)$$

$$\tilde{\gamma} = \frac{\alpha e F}{a \epsilon_0} \quad (4.30b)$$

$$\tilde{z} = \frac{z}{a} \quad (4.30c)$$

$$\tilde{k}_s = a k_s \quad (4.30d)$$

$$\tilde{E} = \frac{E}{\epsilon_0} \quad (4.30e)$$

$$\tilde{V}(\tilde{z}) = \frac{V(z)}{\epsilon_0} \quad (4.30f)$$

Análogo ao caso unidimensional, vamos tomar um potencial do tipo degrau dentro da região e podemos adicionar o efeito Zeeman (Equação (4.6)), a partir de um campo magnético externo na direção x . Com isso nosso Hamiltoniano (4.31) se torna

$$\tilde{H}_{s,s'} = \begin{pmatrix} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + \tilde{V}_0 - \tilde{k}_s^2 \right) \delta_{s,s'} & -2\tilde{\gamma} T_{s'}^s \delta_{n', n+1} + \tilde{\gamma}_Z B \\ 2\tilde{\gamma} T_{s'}^s \delta_{n', n-1} + \tilde{\gamma}_Z B & \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + \tilde{V}_0 - \tilde{k}_{s'}^2 \right) \delta_{s,s'} \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

4.3 Método Semi-Analítico

Em ambos os casos vamos utilizar um método semi-analítico capaz de encontrar a transmissão, reflexão e equação de onda para um número finito de canais. Chamamos esse método de semi-analítico devido ao fato que utilizar valores definidos para as constantes e realizar os cálculos de forma numérica.

Para o primeiro caso, Rashba unidimensional, nosso sistema já se encontra no formato desejado, onde dada uma energia total E já definida, a matriz depende apenas da energia de frente de onda k . Já no segundo caso, podemos fazer o mesmo tomando o *ansatz* de onda plana para a função de onda Ψ , isto é,

$$\begin{pmatrix} \psi_s^+(z) \\ \psi_s^-(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_s^+ e^{ikz} \\ \varphi_s^- e^{ikz} \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

onde φ_s^+ e φ_s^- são constantes representando as amplitudes da frente de onda de energia k (estado s) para spin *up* e *down* respectivamente. Dessa forma, encontramos o sistema dado por

$$\begin{pmatrix} (k^2 + \tilde{V}_0 - \tilde{k}_s^2) \delta_{s,s'} & -2\tilde{\gamma}T_{s'}^s \delta_{n',n+1} + \tilde{\gamma}_Z B \\ 2\tilde{\gamma}T_{s'}^s \delta_{n',n-1} + \tilde{\gamma}_Z B & (k^2 + \tilde{V}_0 - \tilde{k}_s^2) \delta_{s,s'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_s^+ \\ \varphi_s^- \end{pmatrix} = 0 \quad (4.33)$$

Vale ressaltar que devido ao cálculo numérico temos que trabalhar com um número finito de canais. Dessa forma, vamos escolher os N estados que iremos usar em função crescente dos níveis de energia de fermi, que no caso são dados pelos zeros da função de Bessel $\mu_{n,m}$. Portanto, para um número fixo de estados, encontramos um sistema da forma

$$\mathcal{H}(k)\Phi = 0, \quad (4.34)$$

onde \mathcal{H} é a matriz que possui apenas variável k e Φ o vetor com as amplitudes de onda de cada estado, análogo ao encontrado no sistema unidimensional (4.7). O próximo passo será resolver o sistema de equações para k , identificando as constantes φ_i ou, de maneira mais consistente, resolver a equação de determinante nulo para matriz \mathcal{H} . Em outras palavras, assumir que existe k_j que é solução do sistema dado pela Equação (4.34) com Φ diferente de zero implica

$$\det(\mathcal{H}) = 0. \quad (4.35)$$

Retornando à Equação (4.34), substituindo cada valor k_j encontrado com o intuito de encontrar os valores para as constantes do vetor Φ_j , chegamos a uma relação de núcleo de matriz [36], $\mathcal{H}(k_j)\Phi_j = 0$, onde encontramos uma solução a menos de uma constante λ_j ,

$$\begin{pmatrix} \varphi_1^j \\ \vdots \\ \varphi_N^j \end{pmatrix} \lambda_j. \quad (4.36)$$

Portanto, podemos escrever nossa função de onda Ψ_2 na região de spin-órbita como a soma das $2N$ soluções encontradas, isto é,

$$\Psi_2(z) = \begin{pmatrix} \varphi_1^1 \\ \vdots \\ \varphi_N^1 \end{pmatrix} \lambda_1 e^{ik_1 z} + \begin{pmatrix} \varphi_1^2 \\ \vdots \\ \varphi_N^2 \end{pmatrix} \lambda_2 e^{ik_2 z} + \dots + \begin{pmatrix} \varphi_1^{2N} \\ \vdots \\ \varphi_N^{2N} \end{pmatrix} \lambda_{2N} e^{ik_{2N} z}, \quad (4.37)$$

onde, novamente, φ_i^j são os valores dos núcleos para cada solução k_j e λ_j constantes com valores a serem encontrados.

Partindo do mesmo *ansatz* e tomando o elétron viajando no fio na direção z , como indicado na Figura 8, temos para região 1 o elétron incidente na interface e logo uma função de onda com elementos de incidência e reflexão e para a região 3 uma função de onda apenas com elementos de transmissão, onde suas energias são estabelecidas segundo a energia total do canal, ou melhor,

$$\Psi_1(z) = \begin{pmatrix} I_1 e^{i\kappa_1 z} \\ \vdots \\ I_N e^{i\kappa_N z} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} R_1 e^{-i\kappa_1 z} \\ \vdots \\ R_N e^{-i\kappa_N z} \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

e

$$\Psi_3(z) = \begin{pmatrix} T_1 e^{i\kappa_1 z} \\ \vdots \\ T_N e^{i\kappa_N z} \end{pmatrix}, \quad (4.39)$$

onde I_j são os valores das amplitudes de incidência de cada canal, no caso o número de elétrons, R_j os valores da reflexão, T_N os valores da transmissão e κ_j as energias de cada canal, dadas pelos níveis de energia de Fermi. Lembrando que no caso unidimensional, como estamos vendo a relação de spin em um sistema 2×2 , as duas energias de canal serão iguais, enquanto que no caso quase unidimensional essas energias serão dadas por

$$\kappa_s = \sqrt{\tilde{E} - \mu_s^2}. \quad (4.40)$$

O próximo passo é utilizar as condições de contorno nas interfaces das regiões para obter um sistema de equações consistente com o número de incógnitas. Para tal, podemos identificar a continuidade das funções de onda na interfaces,

$$\Psi_1(-L) = \Psi_2(-L) \quad (4.41a)$$

$$\Psi_2(L) = \Psi_3(L), \quad (4.41b)$$

e a continuidade das derivadas, l

$$\left. \frac{\partial \Psi_1(z)}{\partial z} \right|_{z=-L} = \left. \frac{\partial \Psi_2(z)}{\partial z} \right|_{z=-L} \quad (4.42a)$$

$$\left. \frac{\partial \Psi_2(z)}{\partial z} \right|_{z=L} = \left. \frac{\partial \Psi_3(z)}{\partial z} \right|_{z=L} \quad (4.42b)$$

Relembrando que estamos observando o sistema quase unidimensional. No caso unidimensional, ou, de forma geral, quando o Hamiltoniano H possui termos de momento fora da diagonal principal, as relações (4.42) se tornam descontínuas da forma

$$\left. \frac{\partial \Psi_1(z)}{\partial z} \right|_{z=-L} = \left. \frac{\partial \Psi_2(z)}{\partial z} \right|_{z=-L} - \frac{i}{2} \tilde{\sigma} \Psi_2(-L) \quad (4.43a)$$

$$\left. \frac{\partial \Psi_2(z)}{\partial z} \right|_{z=L} = \left. \frac{\partial \Psi_3(z)}{\partial z} \right|_{z=L} - \frac{i}{2} \tilde{\sigma} \Psi_2(L) \quad (4.43b)$$

sendo $\tilde{\sigma}$ a matriz que acompanha os elementos de momento fora da diagonal.

Dessa forma, chegamos a um sistema de equações possível de resolver onde encontramos os valores de λ_j , R_j e T_j . Podemos, por fim, verificar o *ansatz* somando o valor absoluto de todos os elementos de transmissão e reflexão e comparando com o número de elétrons incidentes, onde esperamos um valor correspondente. Essa soma deve ser feita levando em conta apenas os canais onde sua energia não ultrapassa a energia total E , pois energias baixas não serão capaz de excitar elétrons nessa camada e são tratados como ondas evanescentes.

5 Resultados

A partir do método semi-analítico apresentado anteriormente, para cada modelo teórico (unidimensional com 1 e 2 canais e quase unidimensional), conseguimos obter a probabilidade de transmissão e de reflexão em função da energia total do sistema. Neste Capítulo apresentaremos os resultados numéricos da probabilidade de transmissão e de reflexão em função da energia total do sistema variando os diferentes parâmetros: valores da constante de Rashba, campo magnético e potencial. Além disso, fixamos o tamanho da região 2 com o tamanho $L = 2$ (Figura 8), em unidades reduzidas. Obviamente, os resultados são dependentes do tamanho da região 2, mas os fenômenos físicos básicos podem ser compreendidos usando-se um tamanho fixo. Como dito anteriormente 3, a condutância é proporcional à probabilidade de transmissão total, portanto iremos apresentar a probabilidade de transmissão total $|T|^2$, a probabilidade de reflexão total $|R|^2$ e a soma $|R|^2 + |T|^2$, a qual serve como um contador do número de elétrons incidentes no sistema. Nas próximas seções, os resultados serão apresentados de uma maneira construtiva, ou seja, primeiro iremos abordar o caso mais simples e iremos incrementar esse caso passo a passo.

5.1 Caso unidimensional

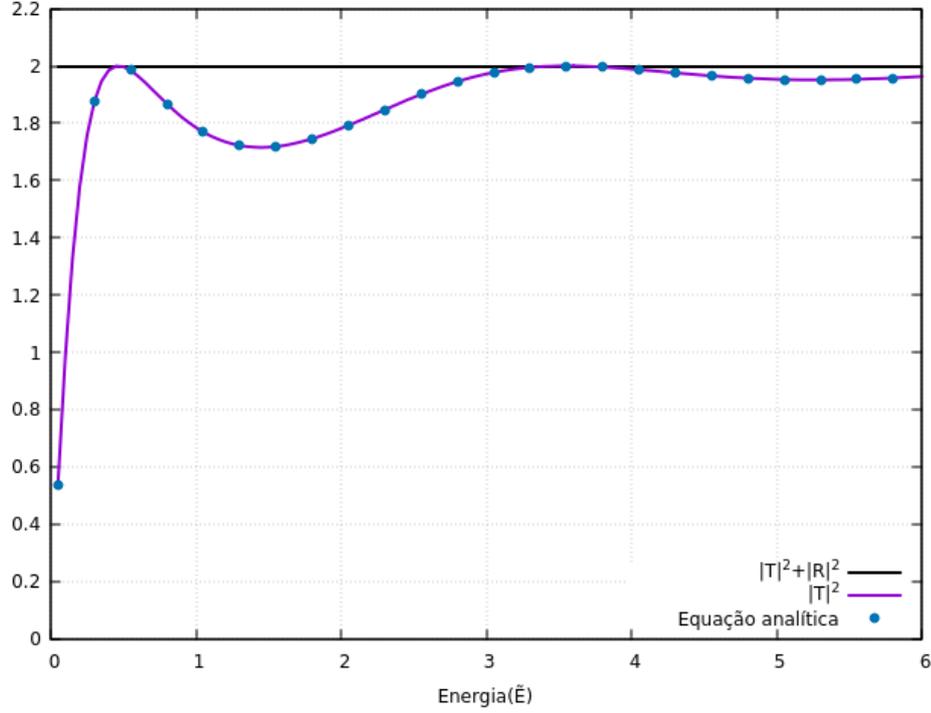
O caso mais simples a ser analisado é o modelo unidimensional, o qual é descrito pela Equação (4.7). Para aplicar o método semi analítico utilizando cálculo computacional, vamos tomar unidades reduzidas (Relações (4.30)). Devemos observar que, no modelo unidimensional, estamos trabalhando com uma matriz 2×2 , portanto teremos a injeção de dois elétrons (um com cada spin) para qualquer energia E . Por isso o máximo valor possível para a transmissão é 2.

Primeiramente, vamos considerar um sistema apenas na presença de potencial na forma de poço, $\tilde{V}_0 = -2$, isto é, sem interação spin-órbita, $\tilde{\gamma}_R = 0$, e campo magnético nulo, $\tilde{B} = 0$, apresentado na Figura 6. Conforme visto na Equação (3.20), para um valor negativo de V_0 , conseguimos utilizar como referência uma transmissão dada pela relação

$$T = \left(\frac{V_0}{4(E + E^2/V_0)} \sin^2 \left(2L\sqrt{V_0}\sqrt{1 + E/V_0} \right) \right)^{-1}. \quad (5.1)$$

Na Figura 9, nós apresentamos os resultados numéricos (linha sólida) e os resultados analíticos (pontos sólidos). Podemos ver que ambos resultados concordam entre si, o que mostra que o método semi-analítico desenvolvido funciona para transmissão de poço de potencial.

Figura 9 – Transmissão para caso 1D com 1 canal, sem interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 0$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).



Em seguida, iremos analisar o caso onde temos apenas a presença da interação spin-órbita, ou seja, tomamos um valor fixo para a força de Rashba, $\tilde{\gamma}_R = 2$, campo magnético nulo, $\tilde{B} = 0$ e potencial nulo, $\tilde{V} = 0$, em unidades reduzidas. Os resultados da Figura 10 podem ser compreendidos usando a abordagem desenvolvida por D. Sánchez [37], que mostrou que o Hamiltoniano unidimensional de Rashba local $\alpha(x)$, onde $\alpha(x) = \gamma_R$ no intervalo $0 < x < \ell$ e zero caso contrário, dado por

$$H = \frac{p_x^2}{2m} - \frac{\{\alpha(x), p_x\} \sigma_y}{2\hbar}, \quad (5.2)$$

pode ser reescrito usando-se uma expansão da função de onda a partir dos auto-estados de spin χ_{\pm} da base de σ_y ,

$$\psi(x) = \psi_1(x)\chi_+ + \psi_2(x)\chi_-. \quad (5.3)$$

e uma transformação de gauge

$$\psi_{1,2} \rightarrow \psi_{1,2} \exp \left\{ \pm i \int k_R(x') dx' \right\}, \quad (5.4)$$

onde $k_R(x) = m\alpha(x)/\hbar^2$. Como resultado, a equação de Schrödinger se torna

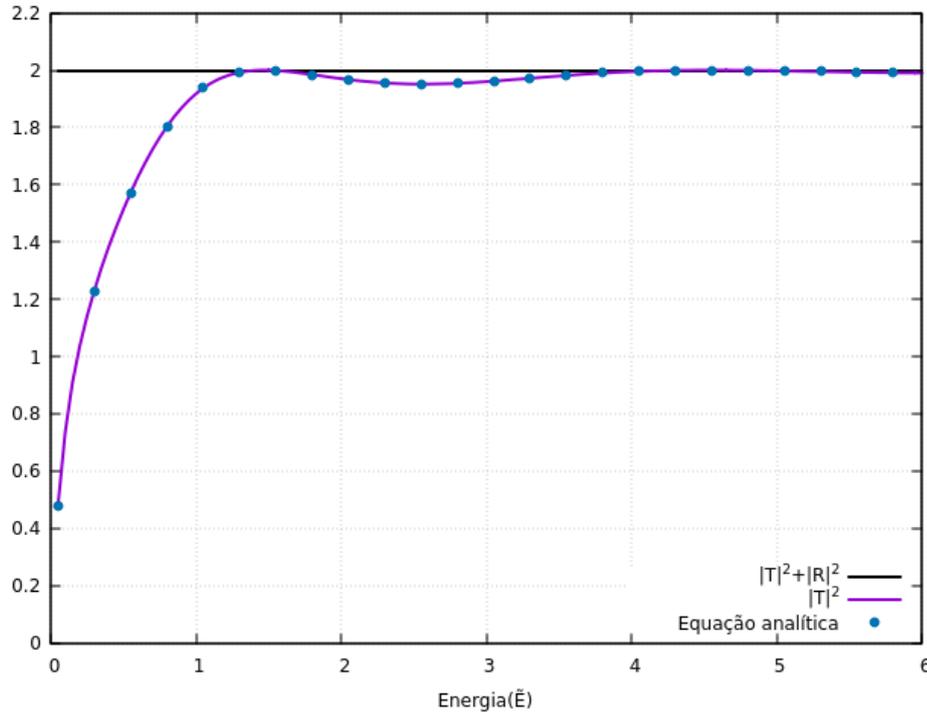
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{1,2}}{dx^2} = \left[E + \left(\frac{\hbar^2 k_R^2}{2m} \right) \right] \psi_{1,2}, \quad (5.5)$$

isto é, o problema de Rashba 1D pode ser mapeado a um problema de poço de potencial quadrado de tamanho ℓ dado por $V_0 = -m\gamma_R^2/\hbar^2$. No nosso caso, podemos utilizar a

expressão de transmissão para poço 5.1 como ajuste de curva, encontrando a seguinte relação 5.5 em unidades efetivas,

$$\tilde{V}_0 = -\left(\frac{\tilde{\gamma}_R}{2}\right)^2. \quad (5.6)$$

Observamos, portanto, que utilizando valor $\tilde{\gamma}_R = 2$ resulta na mesma física que ao Figura 10 – Transmissão para caso 1D com 1 canal, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).



problema de poço para potencial $\tilde{V}_0 = -1$, como pode ser visto na Figura 10. Com essa relação, basta tomar o valor da força de interação de Rashba $\tilde{\gamma}_R = 2\sqrt{2}$ para retornar ao caso de potencial $\tilde{V}_0 = -2$, observado na Figura 9. Em seguida, podemos analisar o caso para uma região com presença tanto da interação spin-órbita, $\tilde{\gamma}_R = 2$, como do potencial do tipo poço, $\tilde{V}_0 = -2$, e campo magnético nulo. Na Figura 11, a curva sólida apresenta os resultados numéricos e, como esperado, os pontos sólidos são os resultados analíticos da equação 5.1 com um potencial $\tilde{V}_0 = -3$, o qual é a soma do potencial \tilde{V}_0 e do potencial efetivo de Rashba $-\left(\frac{\tilde{\gamma}_R}{2}\right)^2 = -1$.

O próximo passo será analisar o caso onde temos apenas a presença de campo magnético constante, isto é, tomando $\tilde{B} = 2$, $\tilde{\gamma}_R = 0$ e $\tilde{V}_0 = 0$. Aqui, a aplicação de um campo magnético local, dado pela Figura 12, apresenta uma transmissão total equivalente à soma das transmissões de efeitos dados por um potencial positivo, $\tilde{V}_0 = 2$, e outro negativo, $\tilde{V}_0 = -2$, já que o campo magnético atua diferentemente para cada spin.

Por fim, podemos tomar uma região sob interação spin-órbita com potencial do tipo poço, $\tilde{V}_0 = -2$, e campo magnético constante, $\tilde{B} = 2$. A Figura 13 mostra a probabilidade

Figura 11 – Transmissão para o caso 1D com 1 canal, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).

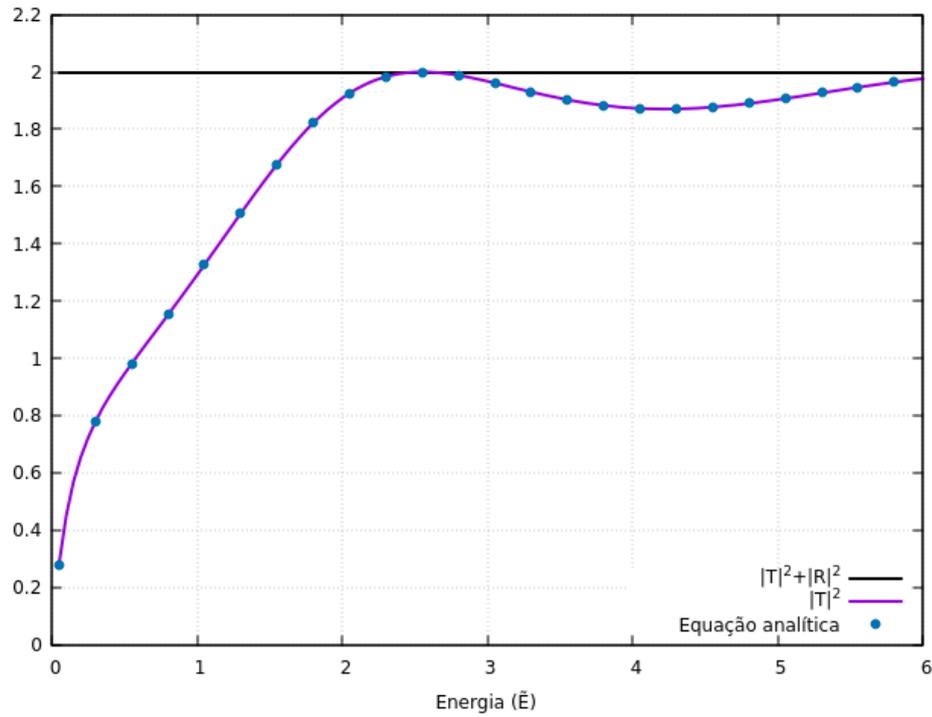
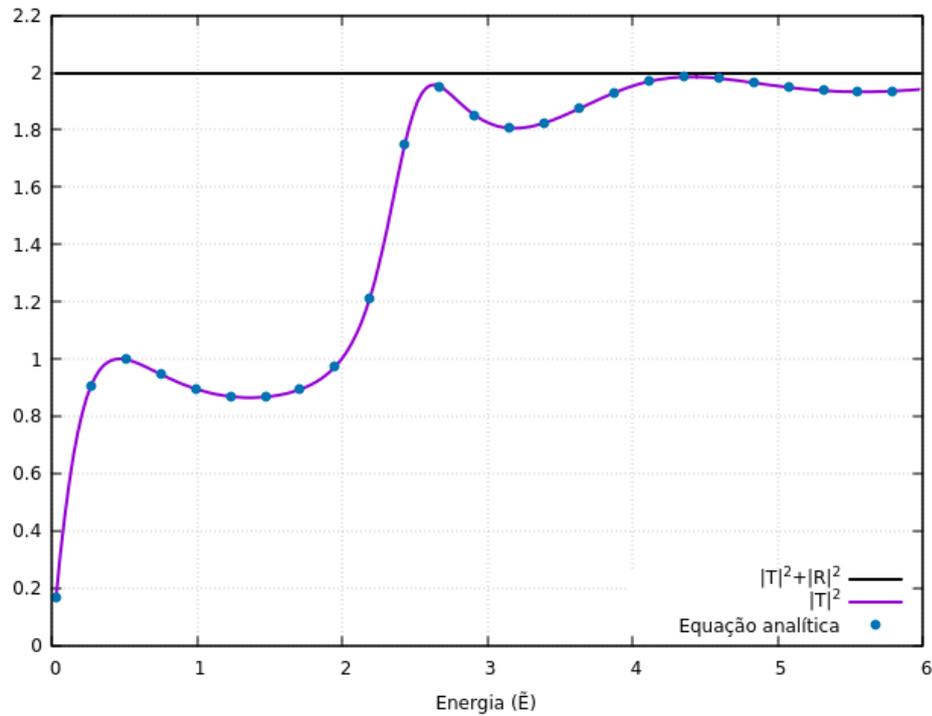


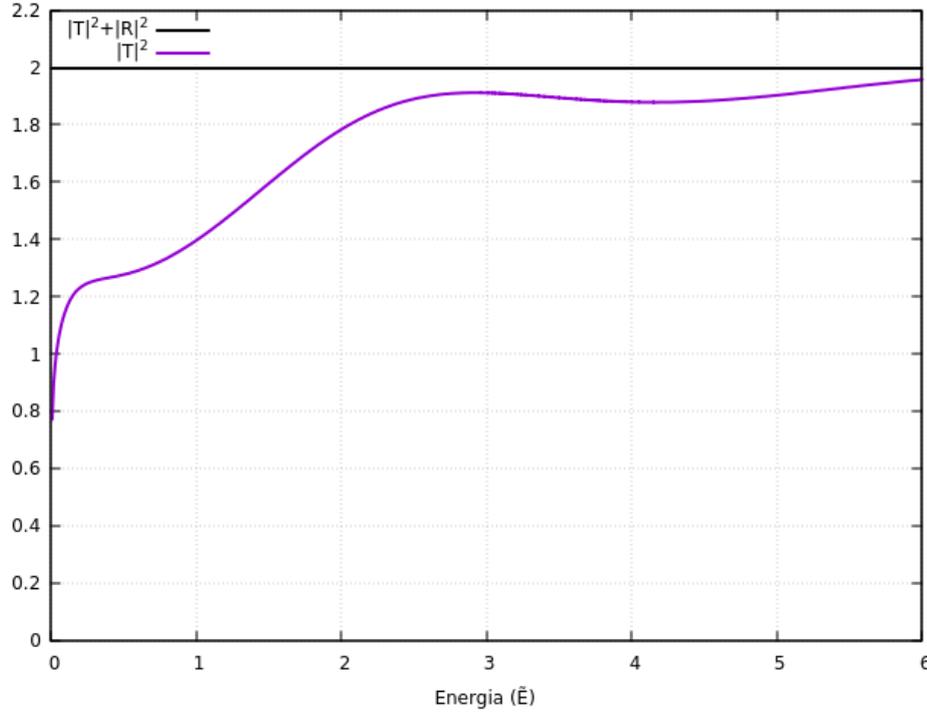
Figura 12 – Transmissão para caso 1D com 1 canal, sem interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 0$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 2$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).



de transmissão em função da energia. Em princípio, podemos pensar que essa transmissão também pode ser calculada analiticamente usando um potencial efetivo. No entanto, nesse caso não é possível encontrar um potencial efetivo porque o campo magnético local é

proporcional à matriz de Pauli σ_x , enquanto que a interação de Rashba é proporcional à matriz de Pauli σ_y . Como essas matrizes não comutam entre si, não é possível encontrar o potencial efetivo para esse caso.

Figura 13 – Transmissão para caso 1D com 1 canal, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 2$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).



Os próximos resultados para o modelo unidimensional foram obtidos considerando que os elétrons com spin distintos possuem energias distintas, ou seja, esse sistema é equivalente ao caso em que um campo magnético na direção z é aplicado ao longo de todo o nanofio. Isso significa que diferentes spins possuem diferentes canais de transporte. Com o intuito de observar as principais mudanças em relação aos resultados apresentados anteriormente, iremos escolher duas energias distintas para cada canal, sendo $\tilde{\epsilon}_1 = 0$ para o canal 1 e $\tilde{\epsilon}_2 = 2$ para o canal 2. O Hamiltoniano para esse caso é igual à

$$H = \begin{pmatrix} k^2 + \tilde{\epsilon}_1 & i\tilde{\gamma}_R k + \tilde{B} \\ -i\tilde{\gamma}_R k + \tilde{B} & k^2 + \tilde{\epsilon}_2 \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

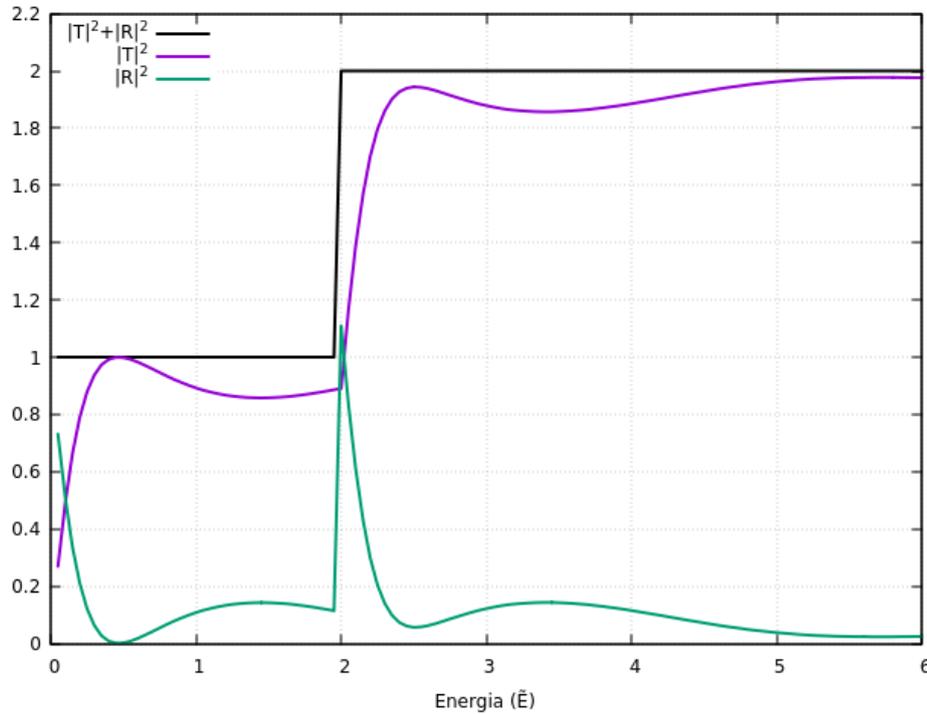
Quando a energia total é menor que a energia do segundo canal, $\tilde{\epsilon}_2$, apenas será transmitido um único elétron. Para energias superiores ao segundo canal, a transmissão pode atingir o valor 2, o que corresponde a transmissão máxima de dois elétrons. Além disso, esperamos também, uma condução distinta do caso anterior, devido ao acoplamento entre os dois canais a partir da interação de Rashba e por usarmos, justamente, energias distintas. De forma análoga ao caso anterior, vamos primeiramente estudar o caso mais simples, ou seja, considerar apenas um potencial do tipo poço, $\tilde{V}_0 = -2$, sem interação spin-órbita, $\tilde{\gamma}_R = 0$, e com campo magnético nulo, $\tilde{B} = 0$. Aqui, a Figura 14 mostra, como esperado, o

comportamento de transmissão, agora para dois canais. Neste caso, também não há uma solução analítica simples porque o termo que se refere as energias de cada canal

$$\begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_1 & 0 \\ 0 & \tilde{\epsilon}_2 \end{pmatrix}, \quad (5.8)$$

não comuta com σ_y . Em outras palavras, não conseguimos escrever $\psi_{1,2}$ na base σ_y (Equação 5.3) de forma que não apareça acoplamento entre os canais, resultando em um problema separável de poço de potencial.

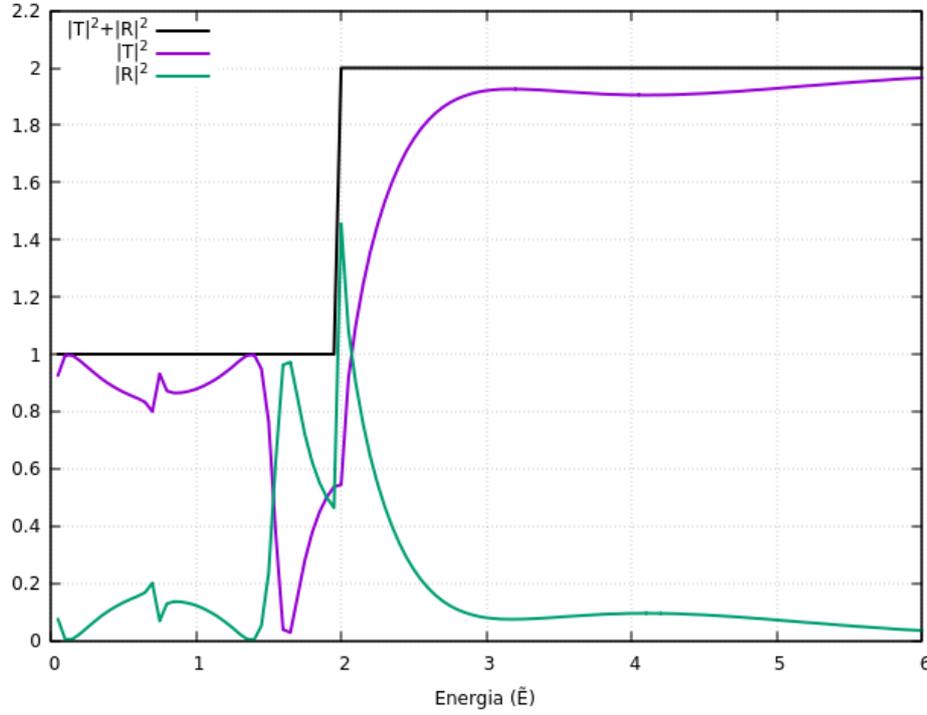
Figura 14 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sem interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 0$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).



Em seguida, vamos analisar um caso ainda sem interação spin-órbita, com campo magnético constante $\tilde{B} = 1$ e potencial do tipo poço $\tilde{V}_0 = -2$. Diferentemente do observado na Figura 15, observa-se um vale (pico) na probabilidade de transmissão (reflexão) para certa energia total do sistema. Esse resultado pode ser compreendido usando-se o trabalho desenvolvido por S. A. Gurvitz [38], que mostrou que uma reflexão ressonante acontece quando estados quase-ligados interagem com estados do contínuo no problema de transporte de dois canais. No nosso caso, o estado quase-ligado está relacionado ao um potencial negativo $\tilde{V}_0 = -2$ e o acoplamento entre os estados do contínuo (2 canais) é devido ao campo magnético local $\tilde{B} = 1$.

Considerando um acoplamento spin-órbita, $\tilde{\gamma}_R = 2\sqrt{(2)}$, campo magnético constante, $\tilde{B} = 1$ e potencial nulo $\tilde{V}_0 = 0$, obtemos os resultados apresentados na Figura 16. Neste caso não temos uma correspondência direta da interação de Rashba com o potencial negativo $\tilde{V}_0 = -2$. Isso também se deve ao fato do termo do Hamiltoniano com

Figura 15 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sem interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 0$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 1$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).



energias distintas para cada canal (5.8) não comutar com o termo de Rashba. Mesmo assim, podemos ver que há um aumento na reflexão para a energia total próxima a energia $\tilde{\epsilon}_2$, o que mostra que o termo de Rashba ainda se comporta como um potencial confinante.

Por outro lado, podemos analisar o caso apenas com interação spin-órbita, $\tilde{\gamma}_R = 2$, tomando um campo magnético nulo, $\tilde{B} = 0$ e potencial nulo $\tilde{V}_0 = 0$, apresentado na Figura 17. Neste caso, também é possível identificar uma reflexão quase total na Figura 17 logo antes da energia do segundo canal. Ou melhor, conseguimos verificar que ocorre uma reflexão ressonante mesmo quando não temos aplicação de campo magnético, $\tilde{B} = 0$. Isso se deve mais uma vez ao fato de que o termo Rashba não comuta com o termo das energias para cada spin. Desse modo, a física nesse caso também é equivalente à de um poço de potencial atrativo com o acoplamento entre os canais de spin.

Ainda com a interação spin-órbita, $\tilde{\gamma}_R = 2$, vamos analisar o caso para campo magnético nulo, $\tilde{B} = 0$, com potencial do tipo poço, $\tilde{V}_0 = -2$. É interessante observar, na Figura 18, que o vale na transmissão ainda se mantém e, além disso, se mostra em uma faixa maior de energia. De forma que o poço potencial altera a condução sem perder a característica de reflexão ressonante, ainda sem campo magnético.

Finalmente, podemos analisar quando temos uma região de interação spin-órbita, com um campo magnético constante, $\tilde{B} = 2$, e um potencial do tipo poço, $\tilde{V}_0 = -2$, apresentada na Figura 19. Aqui, além de observarmos uma alta reflexão antes da energia do segundo canal, esse vale se apresenta em uma faixa de energia. Esse comportamento se

Figura 16 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2\sqrt{2}$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 1$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).

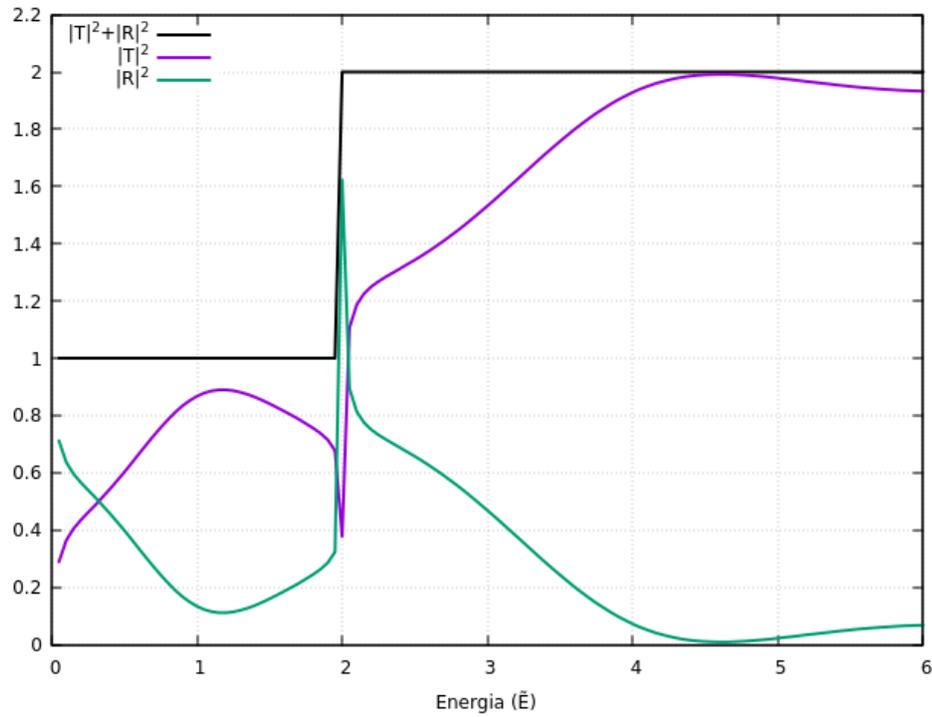
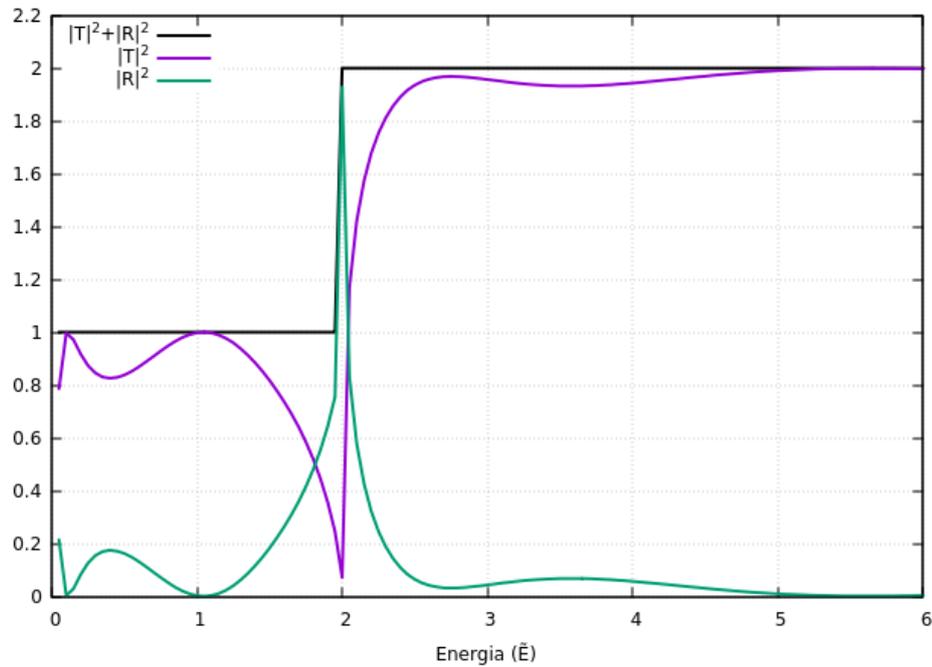


Figura 17 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).



mostra semelhante ao do sistema sob interação spin-órbita e potencial constante, mantendo a reflexão ressonante.

A Figura 20 mostra um sistema com as mesmas interações, porém, com uma região

Figura 18 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético nulo ($\tilde{B} = 0$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).

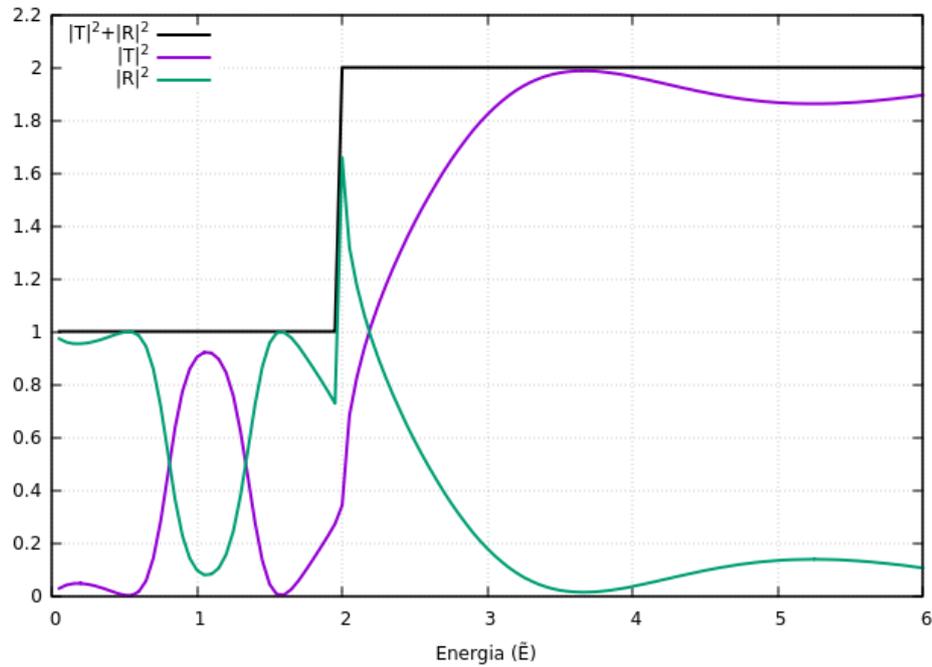
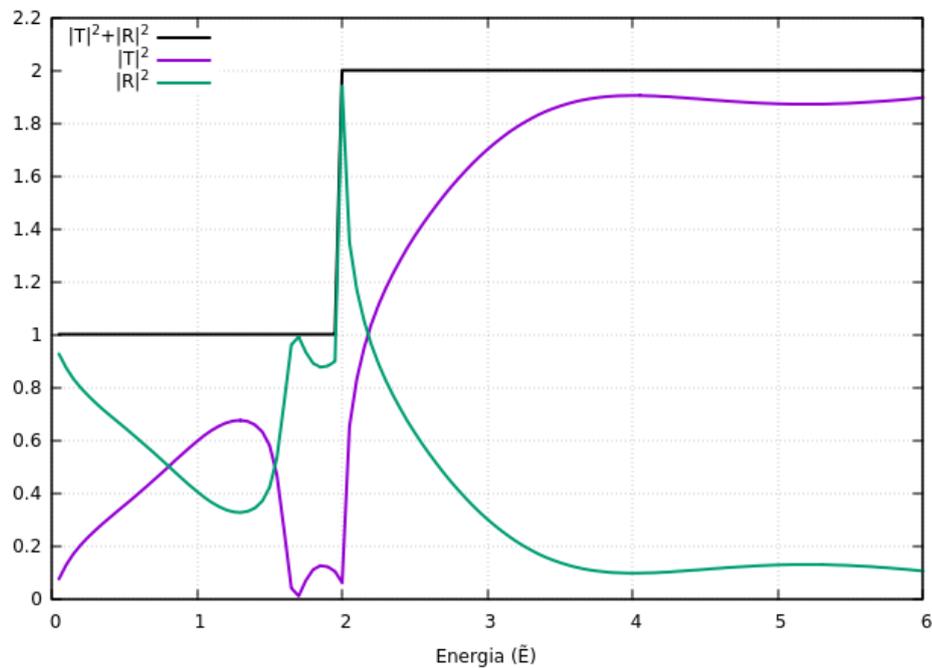
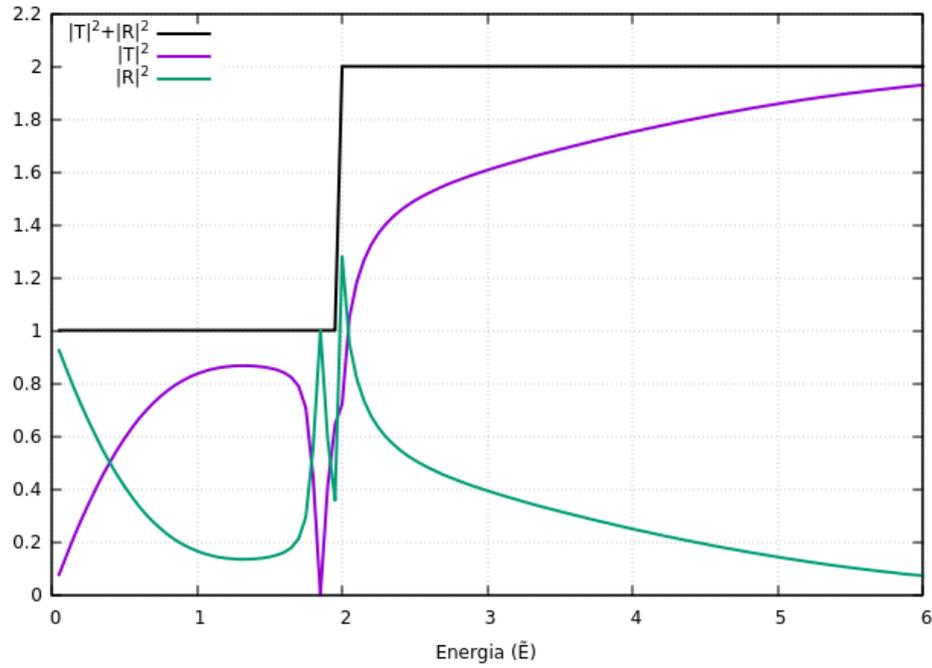


Figura 19 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 2$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).



menor. Podemos ver que o tamanho da região não altera a essência do acoplamento entre os canais assim como a presença do vale na transmissão, mas sim sua oscilação. Em suma, os resultados apresentados nas Figuras 15 e 20 correspondem ao mesmo fenômeno físico, ou seja, do transporte entre dois canais acoplados de energias distintas onde há um potencial espalhador atrativo capaz de suportar pelo menos um estado ligado. Obviamente,

Figura 20 – Transmissão e reflexão para caso 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 2$), campo magnético constante ($\tilde{B} = 2$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$) com região reduzida ($L = 1$).



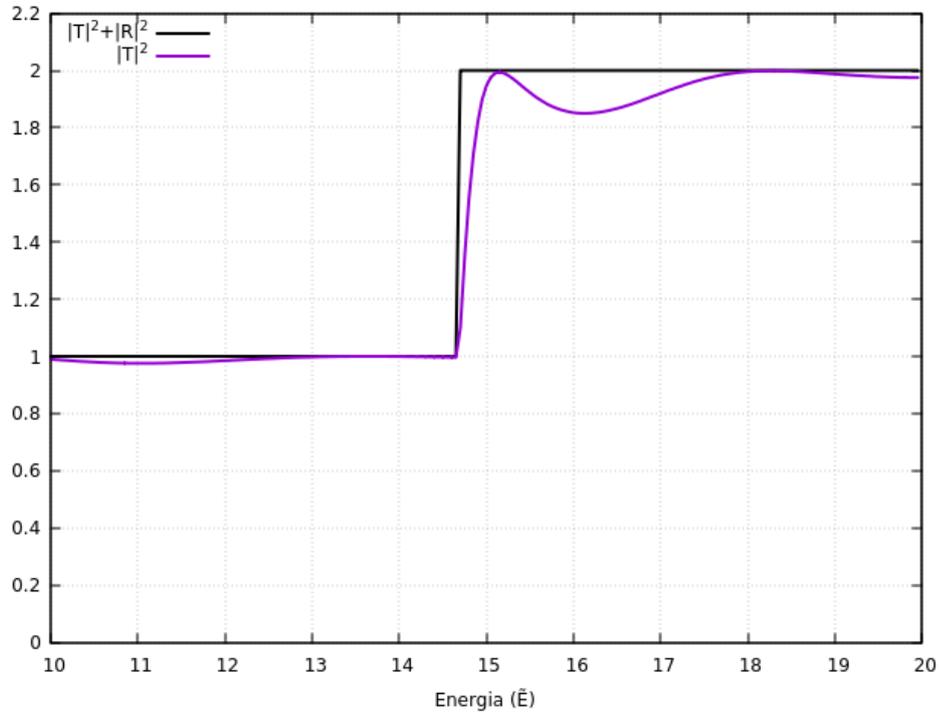
os resultados mostrados nas Figuras 15 20 não são idênticos porque esse fenômeno depende do acoplamento entre os canais, da energia do estado quase-ligado e dos processos de interferência que ocorre entre os dois canais.

5.2 Caso quase unidimensional

Para o caso quase unidimensional, vamos utilizar o sistema dado pela Equação (4.31) e utilizar o método apresentado na Seção 4.3. Diferentemente do caso unidimensional, devemos observar que temos uma construção do Hamiltoniano que depende do número de sub-bandas. Como temos infinitos níveis, para poder abordar o problema numericamente devemos escolher um número finito de estados. Portanto, para o cálculo numérico vamos usar os dez primeiros canais ($N = 10$) em ordem crescente de energia, dadas pelos zeros da função de Bessel. De forma explícita, para a notação $s = |n, m; spin\rangle$, teremos os estados: $|0, 1; +\rangle$, $|-1, 1; -\rangle$, $|-2, 1; +\rangle$, $|0, 2; +\rangle$, $|-3, 1; -\rangle$, $|-1, 2; -\rangle$, $|-4, 1; +\rangle$, $|-2, 2; +\rangle$, $|0, 3; +\rangle$ e $|-5, 1; -\rangle$.

Além disso, vamos supor um semiconductor de forma que temos uma constante de Rashba $\tilde{\gamma}_R = 3.7$. Devemos, ainda, observar que o efeito Zeeman local só irá aparecer como interação de mesmos índices n e m mas com spins opostos, portanto, para os estados escolhidos, não teremos essa contribuição. A primeira análise se dá em verificar o sistema sem o efeito spin-órbita, $\tilde{\gamma}_R = 0$, mas sob a ação de um potencial do tipo poço, $\tilde{V}_0 = -2$, apresentada na Figura 21. Análogo ao caso unidimensional, apresentado na Figura 14, podemos ver uma transmissão total que possui uma oscilação pequena.

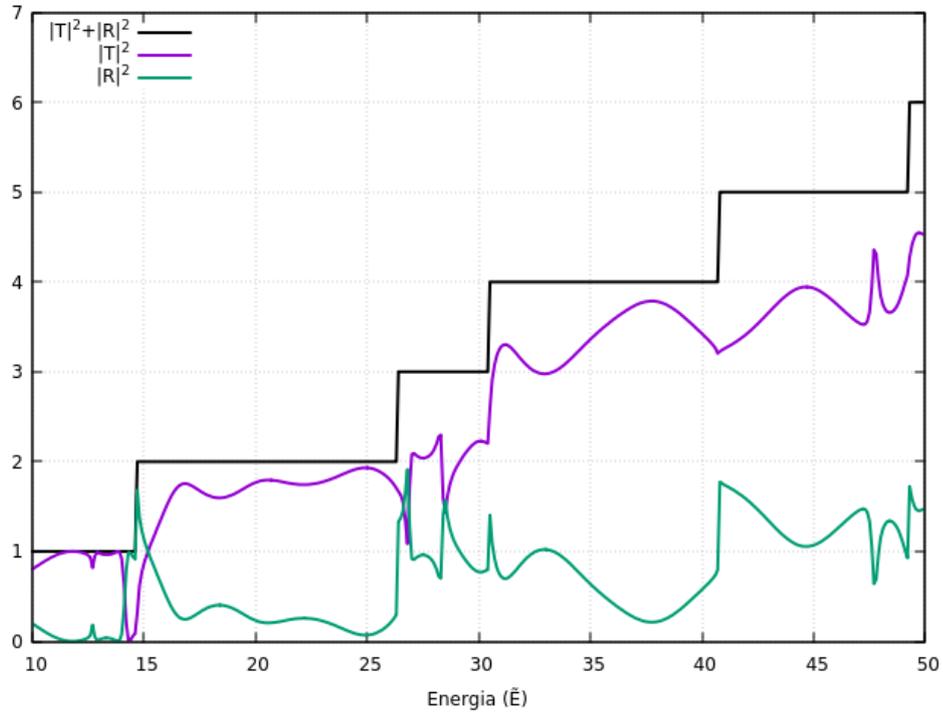
Figura 21 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 10 canais, sem interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 0$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).



Em seguida, vamos considerar o efeito spin-órbita não nulo, $\tilde{\gamma}_R = 3.7$ e com potencial nulo $\tilde{V}_0 = 0$. Na Figura 22 temos o resultado da transmissão onde varremos a energia até $E = 50$, alcançando uma visão até a quinta sub-banda (canal). Em todo os

intervalos de energia de cada canal, vemos uma reflexão ressonante, em específico, para as passagens do primeiro para o segundo canal e do segundo para o terceiro canal, vemos uma queda acentuada. Para uma análise mais detalhada, a Figura 23 mostra os resultados para energia até $E = 20$ considerando mais pontos, o que facilita a observação das duas primeiras sub-bandas. Aqui, podemos ver de forma mais clara os vales na transmissão para $\tilde{E} \approx 12.7$, $\tilde{E} \approx 14.3$ e $\tilde{E} \approx 14.7$. Como esperado, da observação no caso unidimensional, esses vales ocorrem devido ao termo de Rashba que gera um acoplamento entre os canais e um potencial atrativo, mesmo para campo magnético nulo.

Figura 22 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 10 canais, sob interação spin-órbita, $\tilde{\gamma}_R = 3.7$, e potencial nulo, $\tilde{V}_0 = 0$, varrendo pontos até energia $\tilde{E} = 50$.



Nas Figuras 24 e 25 utilizamos os mesmos parâmetros usados na Figura 22, mas consideramos apenas 2 e 3 canais, respectivamente. Podemos ver na Figura 24 que as reflexões ressonantes desaparecem nesse caso. Considerando somente 3 canais, pode-se notar que uma das reflexões ressonantes ocorre para $\tilde{E} \approx 14.7$, o que mostra que o número de canais altera drasticamente a condução através do nanofio.

Utilizando um sistema com 5 canais, encontramos uma transmissão e reflexão idêntica ao de 10 canais, o que mostra que o resultado para $\tilde{E} < 20$ convergiu com 5 canais. Essa relação advém do fato de que os canais são acoplados direta e indiretamente, isto é, os primeiros canais possuem acoplamento direto, enquanto que os canais mais distantes atuam em terceiros, que por sua vez atuam nos canais mais baixos.

Por fim, vamos tomar o caso onde temos uma região sob efeito spin-órbita, $\tilde{\gamma}_R = 3.7$,

Figura 23 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 10 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).

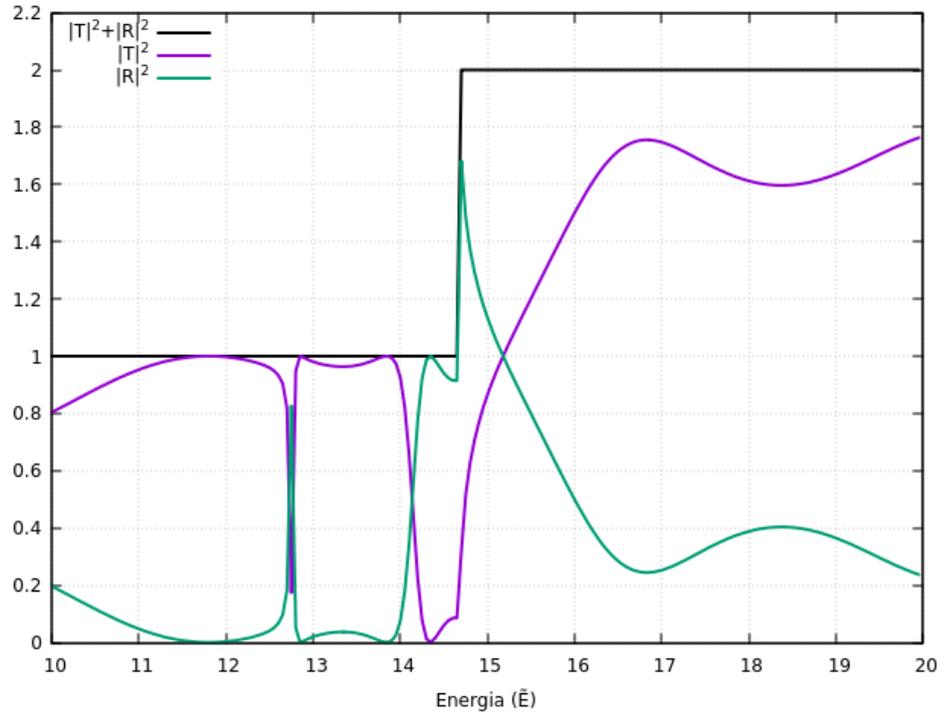
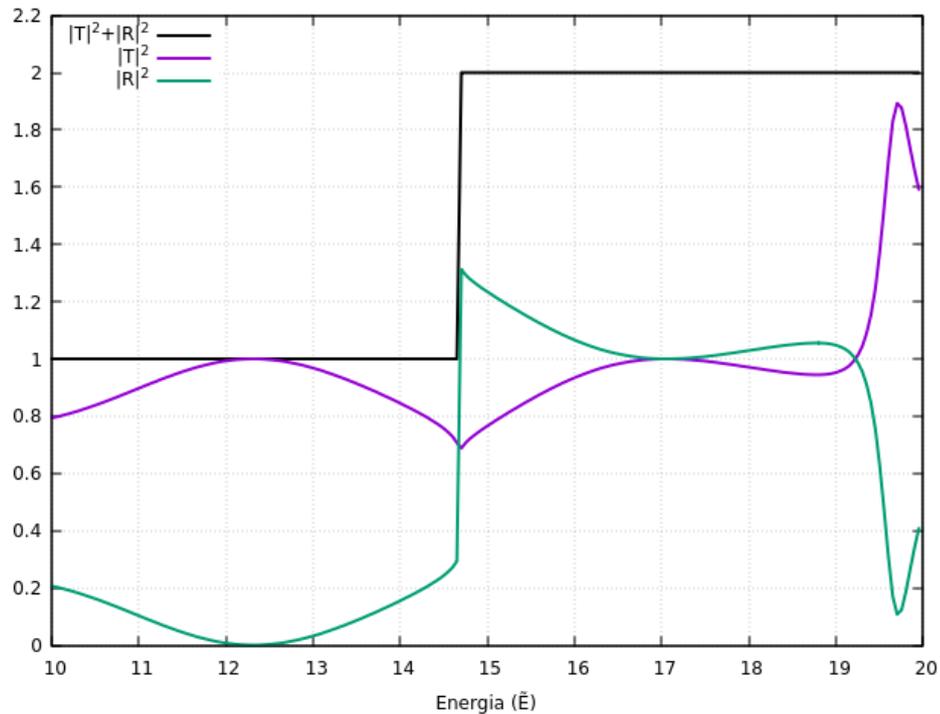


Figura 24 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).



e potencial do tipo poço, $\tilde{V}_0 = -2$, apresentado na Figura 27, considerando 10 canais e com energia total $\tilde{E} < 20$. Os resultados nesse caso são análogos ao caso da Figura 23, pois pode-se observar três distintos pontos onde a reflexão é ressonante. As Figuras 28 e

Figura 25 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 3 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).

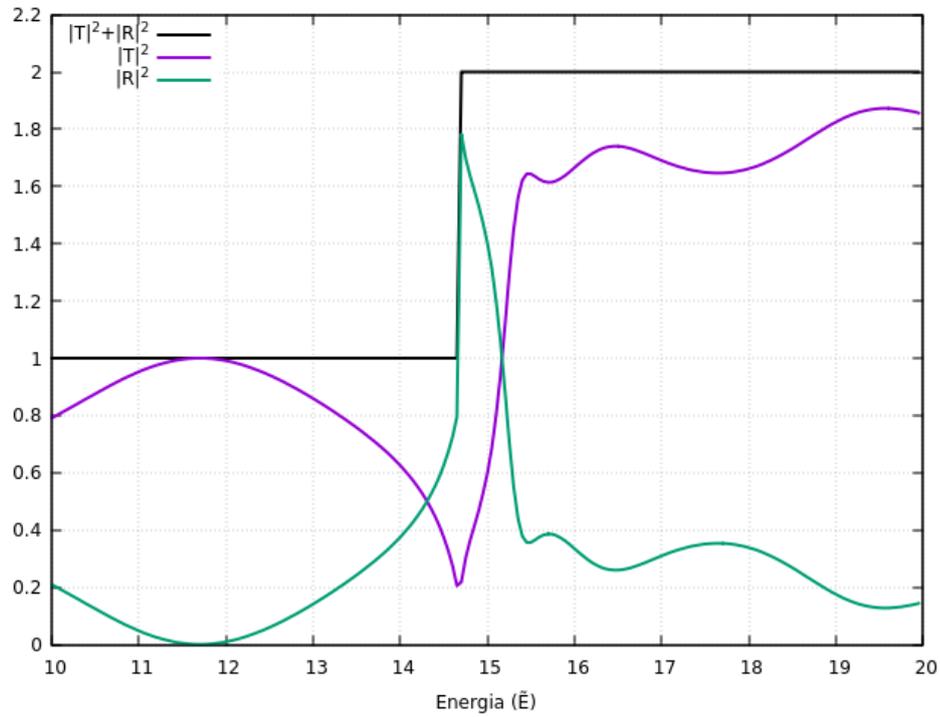
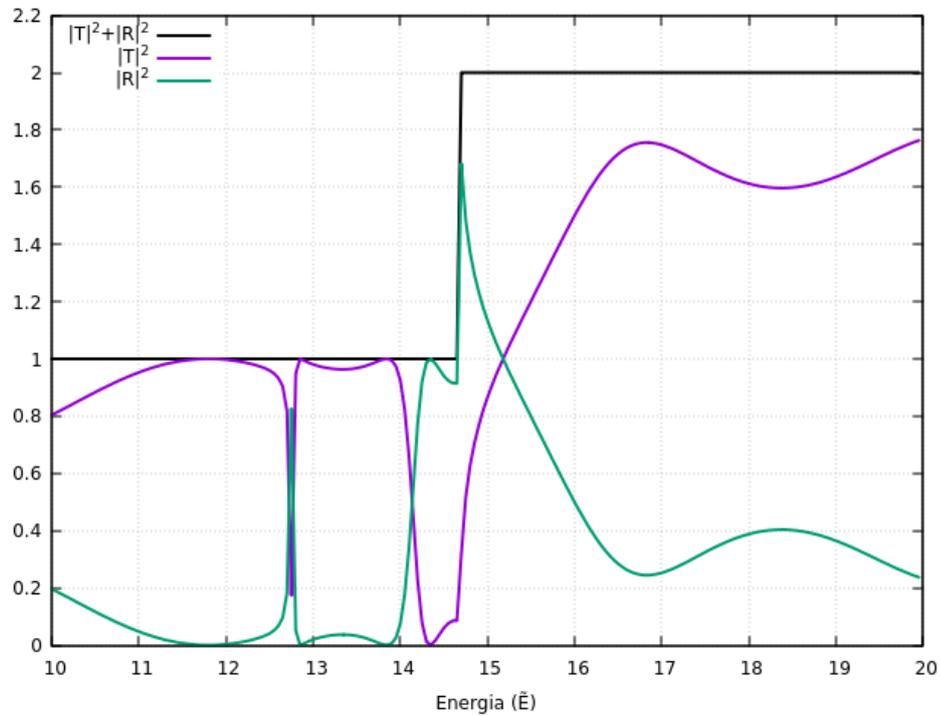
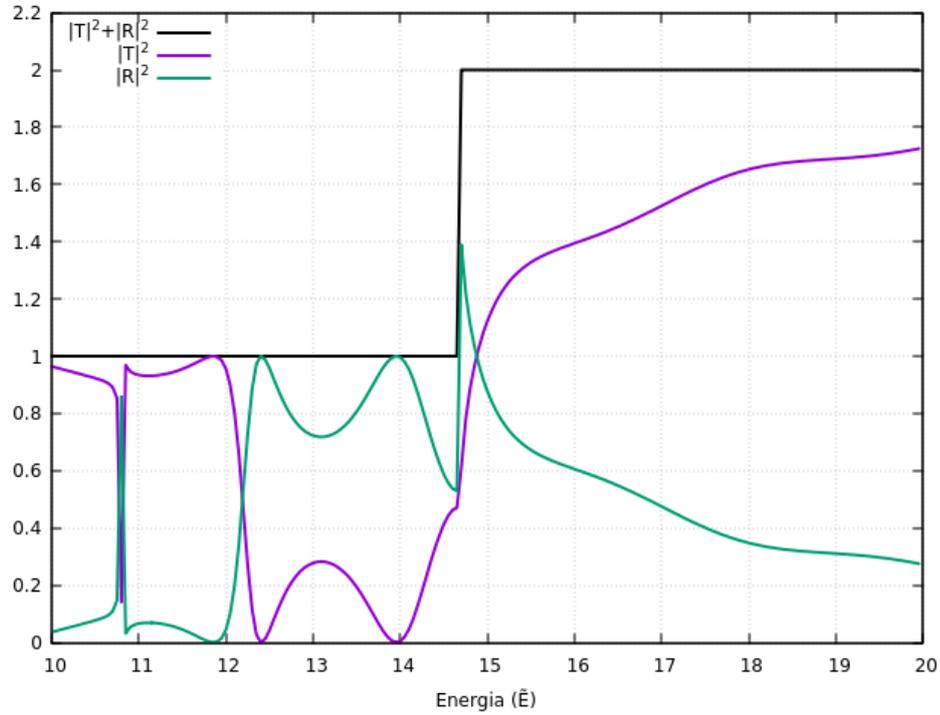


Figura 26 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 5 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial nulo ($\tilde{V}_0 = 0$).



29 também mostram que os resultados considerando 2 e 3 canais não convergiram, mas que os resultados com 10 canais para $\tilde{E} < 20$ podem ser reproduzidos com apenas 5 canais (veja Figura 30).

Figura 27 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 10 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).



As Figuras 28 e 29 apresentam, utilizando interação spin-órbita, $\tilde{\gamma}_R = 3.7$, e potencial, $\tilde{V}_0 = -2$, os sistemas para 1 e 2 canais, respectivamente. Igualmente, vemos, que o número de sub-bandas é altera a relação da condução. Assim como, para 5 canais, encontramos o mesmo gráfico de transmissão e reflexão que o caso de 10 canais. Em especial, a Figura 29, mostra que já com 3 canais temos dois vales na transmissão, sendo o primeiro deles (da esquerda para direita), uma reflexão completa, diferente do observado para potencial nulo.

Figura 28 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 2 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).

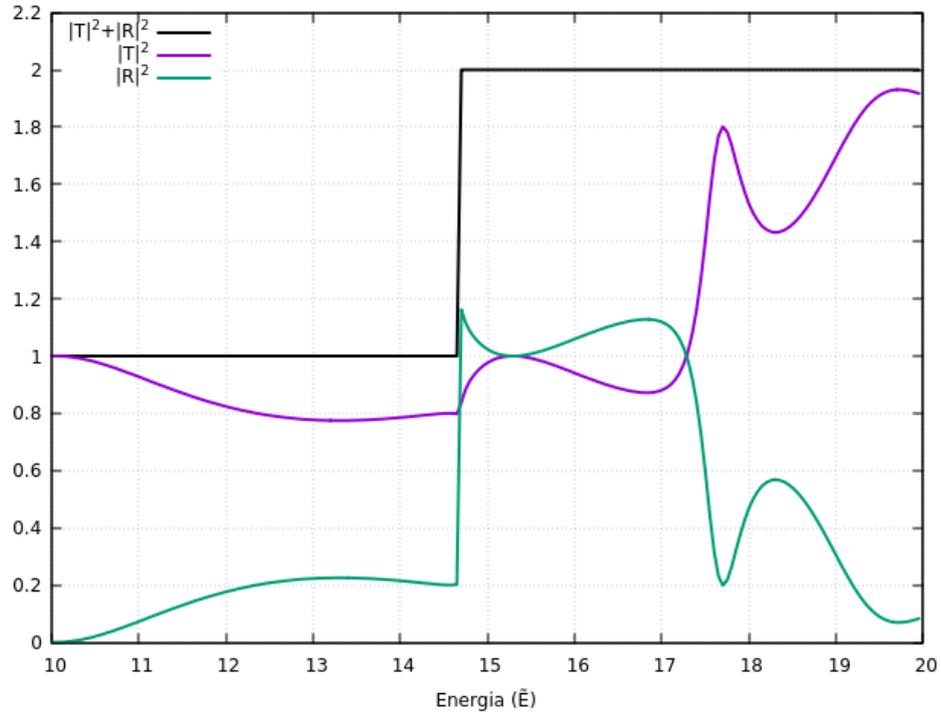


Figura 29 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 3 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).

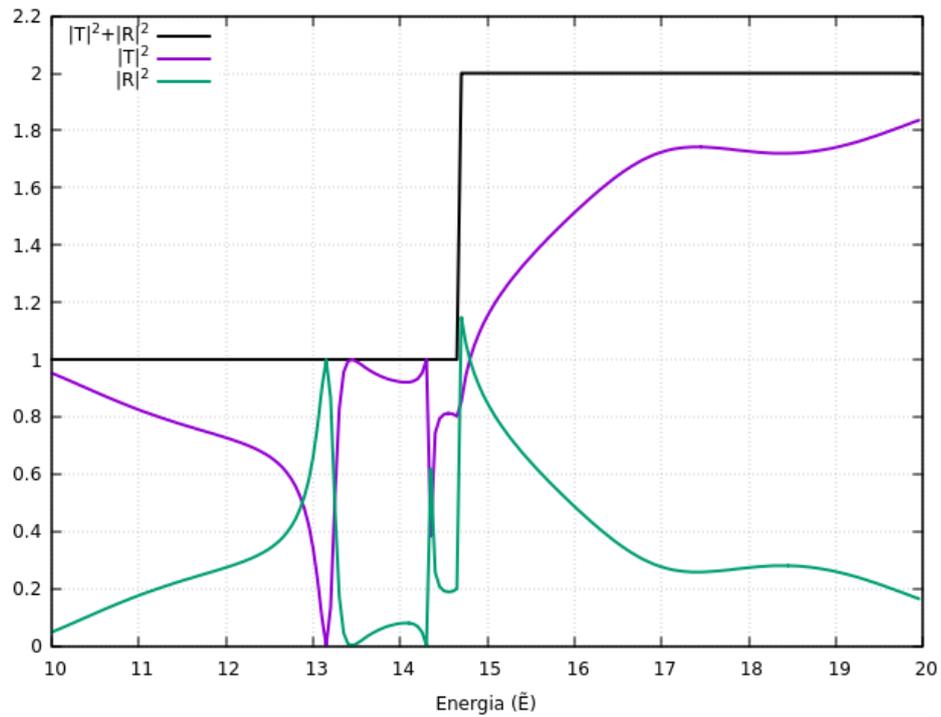
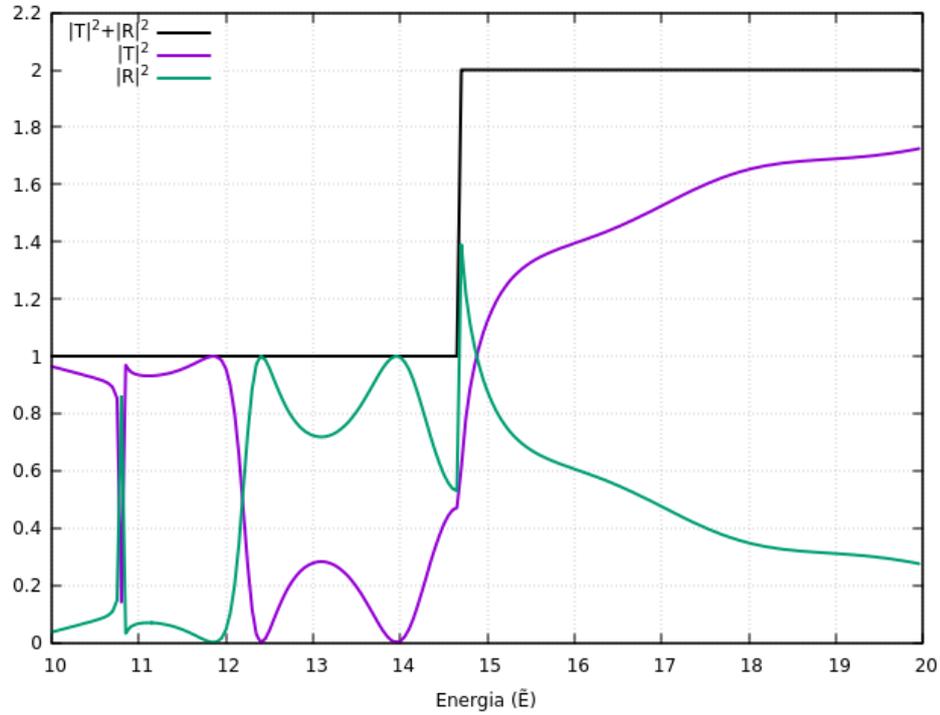


Figura 30 – Transmissão e reflexão para caso quase 1D com 5 canais, sob interação spin-órbita ($\tilde{\gamma}_R = 3.7$) e potencial constante ($\tilde{V}_0 = -2$).



Para o caso unidimensional, vimos que o termo Rashba pode ser representado como sendo um potencial constante atrativo. Vimos ainda, que quando temos elementos de acoplamento de Rashba e energias distintas para cada canal, aparecem vales na transmissão. Já no caso quase unidimensional, além dos efeitos de reflexão ressonante em função da energia total, vimos que o número de canais utilizados no modelo semi analítico altera drasticamente a probabilidade de transmissão, isto é, as subbandas superiores, por mais que sejam canais evanescentes, afetam o transporte dos elétrons com menor energia nos canais propagantes.

6 Conclusão

Neste trabalho, estudamos o transporte em nanofios semicondutores em sistemas unidimensionais e quase unidimensionais. Especificamente, caracterizamos a transmissão e reflexão de elétrons através de uma região com efeito spin-órbita variando como parâmetros a constante de Rasha, campo magnético e potencial. Inicialmente, através do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, estudamos a estrutura eletrônica de materiais semicondutores, do qual deduzimos o Hamiltoniano na aproximação de massa efetiva e o Hamiltoniano de Rashba. Além da estrutura eletrônica do nanofio, o próximo passo foi estudar, a partir do tunelamento de elétrons através de barreira e poço de potencial, como é a física básica da transmissão desses elétrons.

A motivação desse trabalho foi estudar as propriedades de transporte de elétrons considerando a interação de spin-órbita de Rashba localizada em certa região espacial. Além disso, foram consideradas diferentes configurações para a intensidade da interação de Rashba, potencial externo e campo magnético externo aplicado ao nanofio. Desse modo, compreendemos a modulação do transporte eletrônico através da combinação da interação spin-órbita e das dimensionalidades do sistema. Para modelar a condutividade, utilizamos a fórmula de Landauer. Além disso, escolhemos para o estudo, a interação spin-órbita utilizando duas diferentes abordagens teóricas, modelamos o transporte com um caso estritamente 1D e um caso quase-1D caracterizado por um potencial confinante de uma estrutura cilíndrica do fio. Dessa forma conseguimos caracterizar o transporte para um Hamiltoniano de muitos canais, assim como uma expressão para a condutividade. A partir do estudo da estrutura eletrônica e de transporte pudemos construir um modelo semi-analítico que permite encontrar as funções de onda e portanto os coeficientes de transmissão e reflexão através de cálculo computacional.

Com esse tratamento e método utilizado, conseguimos identificar, utilizando a interação de Rashba e diversas combinações com campo magnético e potencial, a transmissão de elétrons através de uma região com interação Rashba e campo magnético local. Vimos que os vales na transmissão devido a reflexão ressonante, ocorre mesmo quando não temos campo magnético aplicado, ou seja, aparecem quando há um potencial atrativo e algum acoplamento entre diferentes canais. Isso acontece, por exemplo, no caso em que temos a interação spin-órbita e dois canais com energias distintas. Observando uma mesma física que os casos que possuem com campo magnético, acoplando diferentes canais, na presença de poço de potencial. Desse modo, os resultados obtidos abrem novas perspectivas para o entendimento de experimentos de transporte em nanofios semicondutores. Por exemplo, recentemente foi observado uma reentrância na condução medida em nanofios semicondutores de InAs [11] mesmo com campo magnético nulo, o que não era esperado

teoricamente [12, 13, 28]. Nesse mesmo artigo [11], os autores propuseram um modelo bem complicado que envolve o espalhamento de duas partículas para explicar o vale na condutância. Futuramente, iremos adaptar os resultados obtidos nessa dissertação para tentar descrever os resultados experimentais [11] utilizando uma física mais fundamental.

Referências

- [1] Brian Winston. *Media, technology and society: A history: From the telegraph to the Internet*. Routledge, 2002. Citado na página 10.
- [2] JM Mikkelson, LA Hall, AK Malhotra, SD Seccombe, and MS Wilson. An nmos vlsi process for fabrication of a 32-bit cpu chip. *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, 16(5):542–547, 1981. Citado na página 10.
- [3] Mario Norberto Baibich, Jean Marc Broto, Albert Fert, F Nguyen Van Dau, Frédéric Petroff, P Etienne, G Creuzet, A Friederich, and J Chazelas. Giant magnetoresistance of (001) fe/(001) cr magnetic superlattices. *Physical review letters*, 61(21):2472, 1988. Citado na página 10.
- [4] Grünberg Binasch, Peter Grünberg, F Saurenbach, and W Zinn. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Physical review B*, 39(7):4828, 1989. Citado na página 10.
- [5] Zhe An, FQ Liu, Y Lin, and C Liu. The universal definition of spin current. *Scientific reports*, 2:388, 2012. Citado na página 11.
- [6] Sadamichi Maekawa, Sergio O Valenzuela, Eiji Saitoh, and Takashi Kimura. *Spin current*, volume 22. Oxford University Press, 2017. Citado na página 11.
- [7] Supriyo Datta and Biswajit Das. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, 56(7):665–667, 1990. Citado na página 11.
- [8] Pojen Chuang, Sheng-Chin Ho, Luke William Smith, F Sfigakis, M Pepper, Chin-Hung Chen, Ju-Chun Fan, JP Griffiths, Ian Farrer, Harvey Edward Beere, et al. All-electric all-semiconductor spin field-effect transistors. *Nature nanotechnology*, 10(1):35, 2015. Citado na página 11.
- [9] Yu A Bychkov and Emmanuel I Rashba. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *Journal of physics C: Solid state physics*, 17(33):6039, 1984. Citado na página 11.
- [10] MI D'yakonov and VI Perel. Possibility of orienting electron spins with current. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 13:467, 1971. Citado na página 11.
- [11] S Heedt, N Traverso Ziani, F Crépin, W Prost, J Schubert, D Grützmacher, B Trauzettel, Th Schäpers, et al. Signatures of interaction-induced helical gaps in nanowire

- quantum point contacts. *Nature Physics*, 13(6):563, 2017. Citado 4 vezes nas páginas 11, 22, 56 e 57.
- [12] Vassilios Vargiamidis, O Valassiades, and DS Kyriakos. Lippmann-schwinger equation approach to scattering in quantum wires. *physica status solidi (b)*, 236(3):597–613, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 57.
- [13] Jens Hjorleifur Bardarson, Ingibjorg Magnúsdóttir, Gudny Gudmundsdóttir, Chi-Shung Tang, Andrei Manolescu, and Vidar Gudmundsson. Coherent electronic transport in a multimode quantum channel with gaussian-type scatterers. *Physical Review B*, 70(24):245308, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 57.
- [14] Felix Bloch. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für physik*, 52(7-8):555–600, 1929. Citado na página 14.
- [15] JM Luttinger. Luttinger, jm, and w. kohn, 1955, phys. rev. 97, 869. *Phys. Rev.*, 97:869, 1955. Citado na página 14.
- [16] JM Luttinger. Jm luttinger, phys. rev. 102, 1030 (1956). *Phys. Rev.*, 102:1030, 1956. Citado na página 14.
- [17] Evan O Kane. Eo kane, j. phys. chem. solids 1, 249 (1957). *J. Phys. Chem. Solids*, 1:249, 1957. Citado na página 14.
- [18] David J Griffiths and Darrell F Schroeter. *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge University Press, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 25.
- [19] Jun John Sakurai. *Advanced quantum mechanics*. Pearson Education India, 1967. Citado na página 15.
- [20] Chin-Yu Yeh, ZW Lu, S Froyen, and Alex Zunger. Zinc-blende–wurtzite polytypism in semiconductors. *Physical Review B*, 46(16):10086, 1992. Citado na página 15.
- [21] Roland Winkler. *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems*, volume 191. Springer Science & Business Media, 2003. Citado 10 vezes nas páginas 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 27 e 28.
- [22] Mariama Rebello de Sousa Dias et al. Transport phenomena in quasi-one-dimensional heterostructures. 2014. Citado na página 15.
- [23] Calin Galeriu. k·p theory of semiconductor nanostructures. *PhD Dissertations. Worcester Polytechnic Institute, Worcester*, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 18.
- [24] Paul Adrien Maurice Dirac. The quantum theory of the electron. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 117(778):610–624, 1928. Citado na página 16.

- [25] Hartmut Haug and Stephan W Koch. *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors: Fifth Edition*. World Scientific Publishing Company, 2009. Citado na página 17.
- [26] Manuel Cardona and Fred H Pollak. Energy-band structure of germanium and silicon: The $k \cdot p$ method. *Physical Review*, 142(2):530, 1966. Citado na página 17.
- [27] Tobias Zibold. *Semiconductor based quantum information devices*. PhD thesis, Technische Universität München, 2007. Citado na página 20.
- [28] P Středa and P Šeba. Antisymmetric spin filtering in one-dimensional electron systems with uniform spin-orbit coupling. *Physical review letters*, 90(25):256601, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 21, 32 e 57.
- [29] John R Reitz, Frederick J Milford, and Robert W Christy. *Foundations of electromagnetic theory*. Addison-Wesley Publishing Company, 2008. Citado na página 22.
- [30] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Frank Laloe. Quantum mechanics, volume 2. *Quantum Mechanics, Volume 2, by Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloe, pp. 626. ISBN 0-471-16435-6. Wiley-VCH, June 1986.*, page 626, 1986. Citado na página 27.
- [31] M Büttiker, Y Imry, R Landauer, and S Pinhas. Generalized many-channel conductance formula with application to small rings. *Physical Review B*, 31(10):6207, 1985. Citado na página 27.
- [32] Rolf Landauer. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philosophical magazine*, 21(172):863–867, 1970. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 29.
- [33] N J Tao. Lecture 8 - landauer formula. Center for Biosensors and Bioelectronics, Biodesign Institute, 2009. Citado na página 29.
- [34] David Ferry and Stephen Marshall Goodnick. *Transport in nanostructures*. Number 6. Cambridge university press, 1999. Citado na página 30.
- [35] George B Arfken and Hans J Weber. *Mathematical methods for physicists*, 1999. Citado na página 34.
- [36] Carlos Alberto Callioli, Hygino Hugueros Domingues, and Roberto Celso Fabrício Costa. *Álgebra linear e aplicações*. Atual, 2007. Citado na página 36.
- [37] David Sánchez and Llorenç Serra. Fano-rashba effect in a quantum wire. *Physical Review B*, 74(15):153313, 2006. Citado na página 40.

-
- [38] SA Gurvitz and YB Levinson. Resonant reflection and transmission in a conducting channel with a single impurity. *Physical Review B*, 47(16):10578, 1993. Citado na página [44](#).