



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO
CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE
TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
(Convênio UFSCar\UFAM)**

**PROPRIEDADES DE TRANSPORTE DE SPINS POLARIZADOS
EM HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS**

Luiz Henrique Pacobahyba

Manaus - AM
2009



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO
CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE
TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
EM FÍSICA
(Convênio UFSCar\UFAM)**

**PROPRIEDADES DE TRANSPORTE DE SPINS POLARIZADOS
EM HETEROESTRUTURAS SEMICONDUTORAS**

Luiz Henrique Pacobahyba

Tese apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos como parte dos pré-requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Orientadores: Prof. Dr. Abraham Moysés Cohen (in memoriam)

Prof. Dr. Antônio Carlos Rodrigues Bittencourt

Manaus - AM
2009

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

P121pt

Pacobahyba, Luiz Henrique.

Propriedades de transporte de spins polarizados em heteroestruturas semicondutoras / Luiz Henrique Pacobahyba. -- São Carlos : UFSCar, 2012.
95 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2009.

1. Física da matéria condensada. 2. Transporte de spins polarizados. 3. Spintrônica. 4. Tunelamento ressonante. I. Título.

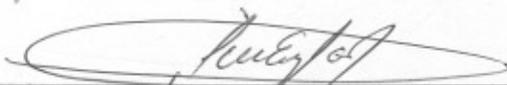
CDD: 530.41 (20^a)

**MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA TESE DE DOUTORADO DE
Luiz Henrique Pacobahya APRESENTADA AO INSTITUTO DE
CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL
DE SÃO CARLOS, EM 25 DE Junho DE 2009.**

Banca Examinadora



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



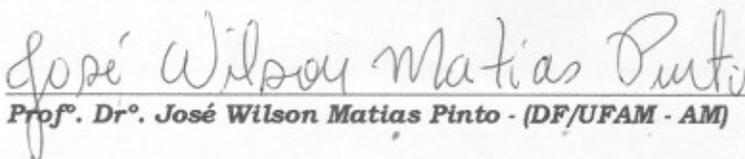
Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques - (DF/UFSCar - SP)



Prof. Dr. Cássio Sanguini Sérgio - (DF/UFRR - RR)



Prof. Dr. Eduardo Adriano Cotta - (DF/UFAM - AM)



Prof. Dr. José Wilson Matias Pinto - (DF/UFAM - AM)

Este trabalho foi realizado com apoio da CAPES

A minha esposa Josefa e a minha filha Amanda, duas estrelas a guiarem meus passos.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de iniciar agradecendo aos professores, colegas e amigos da UFRR, em especial aos professores de Departamento de Física, por tanto terem “segurado a barra”, enquanto eu estava fora.

Gostaria de agradecer a meus familiares, em especial minha mãe, incansável em seu papel de incentivadora.

Meus agradecimentos à minha cunhada Marluce, pois, nos momentos difíceis, assumiu o papel de segunda mãe de minha filha.

Aos amigos, Roberto Câmara, João Bosco e Ednalva, pela amizade sincera.

Àqueles amigos que, durante tantos anos nos acompanharam nessa trilha de estudos: Wagner, Minos, meu caro Zé Roberto, Yamilles, Rosana, João Neto e Márcio. Também aqueles que “chegaram” mais recentemente, como Dilselino, Denis e Andréa, Márcio, Robson e Arnaldo. A todos vocês, meu muito obrigado.

Um agradecimento especial aquele que se tornou um grande amigo nesses últimos meses, meu “irmão” de orientação Edvan.

Meus agradecimentos aos professores da UFAM, Marta Gusmão, Fernandinho, Sanderson e Wilson, pelo apoio, amizade e excelentes momentos passados juntos.

Um agradecimento todo especial à Kátia de Sousa e Rafael, esposa e filho do professor José Ricardo, pelo apoio e amizade nesses anos todos.

Não poderia deixar de registrar meu obrigado ao Departamento de Física da UFSCar e, em especial, à professora Odila, e ao professor Paulo Emmel, pelo apoio e incentivo. Ao professor Gilmar Marques, também da UFSCar, que, mesmo sem me conhecer, aceitou a tarefa de coordenar meu doutorado, meu muito obrigado.

A CAPES meu agradecimento pelo apoio financeiro.

Agradecimentos Especiais

Seria injusto se, em meus agradecimentos, não me referisse a um grupo de pessoas que, de uma forma especial, ajudaram a tornar esse trabalho uma realidade. São eles:

Minha esposa Josefa e minha filha Amanda, por serem “as minhas pernas”, àquelas que me sustentam e me fazem ir sempre em frente.

Professor Dr. José Ricardo de Sousa, efetivamente o “responsável” por esse doutoramento, não só me recebendo em sua residência, logo no início, como ao longo de todos esses anos, com sua amizade. Sem seu apoio nada disso teria sido possível.

Aos amigos, Elzimar, João Luís e Dilson, por terem aberto as portas de suas casas, me recebendo nos momentos em que mais precisei.

Ao professor Bittencourt, inicialmente apenas um colega de trabalho, depois “co-orientador”, depois orientador e, sempre, desde o início, um grande amigo. Pelos infinitos bons momentos de piadas, cafezinhos, discussões, caronas e almoços.

Ao inesquecível e saudoso Professor Abraham Moysés Cohen, que tão cedo nos deixou. Pela orientação, amizade, pelo exemplo de pessoa que foi. Infelizmente a emoção me impede de falar mais.

A esse grupo de pessoas, minha eterna gratidão.

Índice

Abstract	ix
Resumo	x
1 Introdução	1
1.0.1 Spintrônica	2
1.0.2 Tunelamento Ressonante	4
1.0.3 Hamiltonianos de Dresselhaus e Rashba	7
2 Aproximação de Massa Efetiva	12
2.1 Aproximação de Massa Efetiva - Modelo de uma banda	13
2.2 Aproximação de Massa Efetiva em Heteroestruturas	19
3 Modelos de Dresselhaus e Rashba	22
3.1 Representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	23
3.2 Hamiltoniano de Dresselhaus	27
3.3 Hamiltoniano de Rashba	29
4 Probabilidade de Transmissão Dependente do Spin	32
4.1 Solução da Equação de Massa Efetiva	33
4.2 Natureza das Soluções de k_z	39
4.3 Formalismo da Matriz de Espalhamento	41
4.4 Transmissividade Dependente do Spin	45

5	Resultados da Transmissividade	48
5.1	Transmissividade de Spins Polarizados em Dupla Barreira	50
5.2	Eficiência de Polarização	58
6	Corrente de Tunelamento de Elétrons com Spins Polarizados	65
6.1	Densidade de Corrente Spins Polarizados	66
6.2	Corrente de Tunelamento e Spin Polarização para (30,60,30)	68
6.3	Corrente de Tunelamento e Spin Polarização para (50,100,50)	78
7	Conclusões e Perspectivas	87

Lista de Figuras

1.1	Esquema de uma dupla barreira, onde estão mostrados os coeficientes de entrada e saída das duas barreiras.	6
3.1	Representação esquemática da estrutura de banda dos compostos III-V, na vizinhança do ponto Γ , mostrando a lacuna fundamental (EG) e a energia spin órbita (Δ). Os símbolos Γ_J , referem-se às representações das funções de Bloch sem <i>spin</i> (à esquerda) e com <i>spin</i> (à direita). Os números em parênteses indicam a degenerescência total em cada caso.	27
4.1	Anisotropia angular e dispersões no <i>bulk</i> para a polarização σ^+ para $k_{\parallel} = 2,98 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ e $\mathcal{E}_0 = 5 \text{kV/cm}$	36
4.2	Dispersões <i>up</i> e <i>down</i> em função de φ para o regime BIA dominante com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ (a) e para o regime SIA com $k_{\parallel} = 0,9198 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ (b), para campo $\mathcal{E}_0 = 5 \text{kV/cm}$. As linhas pretas correspondem as dispersões <i>spin up</i> , as vermelhas <i>spin down</i> para o Hamiltoniano completo (BIA + SIA) e, as linhas verdes com somente termo de Rashba.	37
4.3	Dependência angular do <i>spin splitting</i> no <i>bulk</i> do InAs para $k_z = 0$ e campo $\mathcal{E}_0 = 5 \text{kV/cm}$. Na parte (a) mostramos essa dependência para $k_{\parallel} \leq k_{\parallel}^c$ (regime SIA) e $k_{\parallel} \geq k_{\parallel}^c$ (regime BIA). Na parte (b) mostramos a comparação entre as interações de Rashba e Dresselhaus; a linha vermelha corresponde aos termos BIA + SIA e a linha verde ao termo BIA.	38

4.4	Gráfico genérico das relações de dispersão <i>up</i> e <i>down</i> , mostrando claramente as energias críticas E_1, E_2, E_3 e E_4	40
4.5	Dependência angular do vetor de onda k_z <i>up</i> (linha preta) e <i>down</i> (linha vermelha) para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, campo $\mathcal{E}_0 = 5 \text{kV/cm}$ e energia $E_k = 200 \text{meV}$	41
4.6	Representação esquemática de uma heteroestrutura, crescida ao longo do eixo z, mostrando as diversas regiões, bem como os coeficientes das ondas das diversas regiões.	42
5.1	Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100,100,100) de InAs/GaSb com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, $\varphi = 30^0$ para campo elétrico nulo. A parte (a) para partícula <i>up</i> incidente e a parte (b) para partícula <i>down</i> incidente.	51
5.2	Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) de InAs/GaSb com $k_{\parallel} = 0, 1 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, $1 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, $\varphi = 30^0$ para campo elétrico nulo para partícula <i>down</i> incidente.	53
5.3	Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100,100,100) de InAs/GaSb para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, $\varphi = 30^0$ e campo elétrico $E = 100 \text{kV/cm}$, com partículas <i>up</i> e <i>down</i> incidentes.	54
5.4	Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) de InAs/GaSb para $2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, $\varphi = 30^0$ e campos elétricos $E = 40, 80$ e 100kV/cm para elétron <i>up</i>	55
5.5	Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) de InAs/GaSb com $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ e $2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, $\varphi = 30^0$ para campo elétrico 100kV/cm . Parte (a) para partícula <i>up</i> incidente e (b) partícula <i>down</i> incidente.	56
5.6	Módulo do <i>mixing</i> \mathcal{H}_{12} para o Hamiltoniano completo (linha preta) e só com termo de Dresselhaus (linha vermelha).	57

5.7	Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) de <i>InAs/GaSb</i> com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ para campo elétrico $E = 100 \text{kV/cm}$ com $\varphi = 45^0$ na parte (a) e 135^0 na parte (b).	58
5.8	Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) de <i>InAs/GaSb</i> para $\varphi = 0^0, 30^0, 45^0, 75^0$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ para campo elétrico $E = 100 \text{kV/cm}$. A parte (a) para <i>up</i> incidente e (b) para <i>down</i> incidente.	59
5.9	Eficiência de Polarização em função da energia em heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) para $\varphi = 0^0, 30^0, 45^0, 75^0$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ com somente termo BIA com campo elétrico nulo.	60
5.10	Eficiência de Polarização em função da energia em heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) para $\varphi = 30^0$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ para campos elétricos $E = 0$ (linha preta), 40kV/cm (linha azul) e 100kV/cm (linha vermelha).	61
5.11	Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) de <i>InAs/GaSb</i> com $\varphi = 30^0$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ para incidência <i>spin up</i>	62
5.12	Eficiência de Polarização em função da energia em heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) para $\varphi = 45^0$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ para campos elétricos $E = 0$ (linha preta), 40kV/cm (linha azul) e 100kV/cm (linha vermelha).	63
5.13	Eficiência de Polarização em função da energia em heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) para $\varphi = 30^0$ e $k_{\parallel} = 1, 2, 3 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ para campo elétrico $E = 0$	63
5.14	Eficiência de Polarização em função da energia em heteroestrutura de dupla barreira para $\varphi = 0^0$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ e para campo elétrico $E = 0$ para as larguras (50, 100, 50) na parte (a) e (30, 60, 30) na parte (b).	64

6.1	(a) Esquema de montagem de uma heteroestrutura em dupla barreira; (b) Dupla barreira ressonante, mostrando os efeitos da dopagem; (c) Efeito da aplicação do campo elétrico na dupla barreira.	66
6.2	Energias críticas E_{c3} e E_{c4} mostrando os limites de integração para o momento paralelo.	69
6.3	Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ para $E_F = 20meV$. (a) Elétrons <i>up</i> incidente e (b) elétrons <i>down</i> incidente com somente termo BIA.	71
6.4	Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ para $E_F = 20meV$. (a) <i>up out</i> para incidência <i>up</i> , e <i>down out</i> para incidência <i>down</i> (b) <i>up out</i> para incidência <i>down</i> , e <i>down out</i> para incidência <i>up</i> com somente termo BIA.	72
6.5	Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ para $E_F = 20meV$. (a) Elétrons <i>up</i> incidente e (b) elétrons <i>down</i> incidente com termos BIA + SIA.	74
6.6	Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ para $E_F = 20meV$. (a) <i>up out</i> para incidência <i>up</i> , e <i>down out</i> para incidência <i>down</i> (b) <i>up out</i> para incidência <i>down</i> , e <i>down out</i> para incidência <i>up</i> com termos BIA + SIA.	75
6.7	Efeitos da interação BIA + SIA nas correntes <i>up out</i> e <i>down out</i> em dupla barreira ressonante para elétron <i>up</i> incidente (a) e <i>down</i> incidente (b).	76
6.8	Spin Polarização de elétrons em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ com larguras $(30, 60, 30) \text{ \AA}$ para $E_F = 20meV$ com os efeitos da interação BIA (linha preta) e BIA + SIA (linha vermelha).	77

6.9	Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ para $E_F = 55meV$ com somente termo BIA na parte (a) para <i>spin up</i> incidente e na parte (b) <i>spin down</i> incidente e com termo BIA + SIA nas parte (c) e (d) para incidências <i>up</i> e <i>down</i> respectivamente.	79
6.10	Spin Polarização de elétrons em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ com larguras (30, 60, 30) Å para $E_F = 55meV$ com os efeitos da interação BIA (linha preta) e BIA + SIA (linha vermelha).	80
6.11	Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ (50, 100, 50) Å para $E_F = 20meV$ com o termo BIA + SIA na parte (a) para <i>spin up</i> incidente e na parte (b) para <i>spin down</i> incidente.	82
6.12	Spin Polarização de elétrons em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ com larguras (50, 100, 50) Å para $E_F = 20meV$ com os efeitos BIA + SIA.	83
6.13	Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ (50, 100, 50) Å para $E_F = 55meV$ com o termo BIA + SIA na parte (a) para <i>spin up</i> incidente e na parte (b) para <i>spin down</i> incidente.	84
6.14	Spin Polarização de elétrons em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ com larguras (50, 100, 50) Å para $E_F = 55meV$ com os efeitos BIA + SIA.	85
6.15	Spin Polarização de elétrons em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ com larguras (100, 100, 100) Å para $E_F = 20meV$ com termo completo da interação spin órbita.	86

Lista de Tabelas

IV.1 Natureza das soluções de kz	40
V.1 Coeficientes de Dresselhaus e Rashba e Massa efetiva, para os compostos utilizados no trabalho	50

Abstract

In this work we used the technique of scattering matrix to calculate the transmissivity of polarized spins in a semiconductor symmetrical double-barrier heterostructure. The dynamics of carriers is described by effective mass approximation applied to models of Dresselhaus and Bychkov-Rashba. In the former case, the hamiltonian was studied in its full form, free of approximations.

Both models describe interactions of type Spin-orbit, which is basically a coupling between the orbital angular moment of the electron with its magnetic moment of spin. This type of coupling as a consequence creates a splitting of some levels of energy, initially degenerate, resulting in a spectrum of energy more complex than that obtained without taking it into account such interactions.

The transmissivity is calculated as a function of some parameters, for the type *InAs/GaSb/InAs/GaSb/InAs*. All results are compared with literature, and provide new information about the systems.

The effects of spin-orbit interactions of Rashba and Dresselhaus show is very favorable to engineering in the manufacture of filter spin and spintronic devices, as well as the injection of spin in quantum wells and semiconductor detectors based on non-magnetic asymmetric double barrier.

Resumo

Neste trabalho usamos a técnica da matriz de espalhamento para calcular a transmissividade de spins polarizados através de heteroestruturas semicondutoras de dupla barreira simétrica. A dinâmica dos portadores é descrita pela aproximação de massa efetiva aplicada aos modelos de Dresselhaus e Bychkov-Rashba. Sendo o primeiro hamiltoniano estudado em sua forma completa, isenta de aproximações. Ambos os modelos descrevem interações do tipo spin órbita, que é, basicamente, um acoplamento entre o momento angular orbital do elétron com seu momento magnético de spin. Esse tipo de acoplamento gera como consequência um desdobramento de alguns níveis de energia, inicialmente degenerados, acarretando em um espectro de energia mais complexo do que àquele obtido sem levar-se em conta tais interações. A transmissividade é calculada como função de alguns parâmetros que controlam a eficiência de polarização, para uma heteroestrutura do tipo *InAs/GaSb/InAs/GaSb/InAs*. Os efeitos das interações spin órbita de Dresselhaus e Rashba mostram-se bastante favoráveis à fabricação de dispositivos spintrônicos, bem como a injeção de spin em poços quânticos e detectores baseados em semicondutores não magnéticos em dupla barreira assimétrica.

Capítulo 1

Introdução

Visto desde os tempos da graduação como um dos problemas “clássicos” da mecânica quântica, o tunelamento de partículas através de barreiras de potencial apresenta ainda hoje várias aplicações nas mais diversas áreas da física ou das engenharias. Manifestação clara da natureza ondulatória da matéria, não possuindo análogo clássico, o efeito túnel, serviu como explicação para vários enigmas passados, mas que hoje são completamente compreendidos.

O que, aparentemente se constituía apenas num problema acadêmico, se mostrou uma nova fronteira para pesquisas de alto nível. Mais recentemente, as novas técnicas de crescimento de filmes finos (por exemplo, MBE - Molecular Beam Epitaxy, ou MOCVD - Metal Organic Chemical Vapour Deposition) têm permitido a confecção de heteroestruturas artificiais de melhor qualidade, levando pesquisadores do mundo inteiro ao estudo de dispositivos que permitam a manipulação de informações à nível quântico, caminho natural a ser seguido, visto que a miniaturização dos componentes eletrônicos tende a persistir. Em especial, a transmissão de spins em heteroestruturas tem se mostrado uma área bem produtiva e com resultados promissores. A manipulação de spins com fins de transmissão e processamento de informações deu origem a uma nova área da ciência conhecida como spintrônica. Neologismo que pode ser traduzido como "eletrônica baseada em spins".

Já em 1990 S. Datta e B. Das [1], propuseram um modulador para elétrons em analogia ao modulador eletro-óptico. A modulação, ou manipulação, dos spins se dava pela precessão dos mesmos causada pela interação spin órbita em semicondutores de *gap* estreito.

Outro produto que pode ser considerado de extrema importância na spintrônica é a válvula de spin. Esse dispositivo tem sua resistência elétrica controlada pela direção dos spins, ou em outras palavras, da magnetização de uma camada magnética sensora. Sua estrutura básica consiste de 4 camadas de filmes finos, depositadas em sequência sobre um substrato apropriado (vidro, cristal isolante ou mesmo um semicondutor). A camada superior é um filme de metal magnético mole, com baixa anisotropia magnética. Ela é a camada sensora propriamente dita, pois é a direção de sua magnetização, determinada por um campo magnético externo, que controla a resistência do dispositivo.

Como era esperado, a tal nível de miniaturização, fenômenos desconhecidos, ou desprezíveis à nível macroscópico passam a influenciar os resultados. Dos vários compostos conhecidos, heteroestruturas do tipo *InAs/GaSb* são usualmente mais estudadas por terem uma característica desejável, a de que seus parâmetros de rede serem aproximadamente iguais, o que proporciona uma junção mais perfeita nas interfaces do dispositivo, minimizando-se efeitos de tração (*stress*) ou compressão (*strain*). Tais efeitos, comuns em heteroestruturas, não foram considerados explicitamente nesse trabalho.

Dentre as várias interações que podem ser estudadas numa heteroestrutura semicondutora, as interações do tipo spin órbita são fundamentais. Fonte natural de um “refinamento” na estrutura de níveis de qualquer sistema, a interação spin órbita tem como principal característica a quebra de degenerescência (separação) de níveis de energia aparentemente únicos.

1.0.1 Spintrônica

De modo simples, podemos traduzir Spintrônica como sendo a parte da eletrônica que se baseia no spin do elétron, e não tanto em sua carga, como na eletrônica "clássica". As

pesquisas na área da spintrônica surgiram a partir de experiências da dependência com o spin, em fenômenos de transporte, em dispositivos de estado sólido feito na década de 1980, incluindo aí a observação, feita por Johnson and Silsbee [2], da injeção de spins polarizados de um metal ferromagnético para um metal normal (não ferromagnético). Outro fator fundamental para o desenvolvimento da spintrônica foi a da descoberta da magnetoresistência gigante, independentemente por Albert Fert et. al. [3], na Universidade de Paris-Sud, e Peter Grünberg et al. (1988) [4] no Jülich Research Centre. Essa descoberta é considerada o marco do nascimento da spintrônica moderna. Origens mais antigas podem ser consideradas após os experimentos pioneiros de Meservey e Tedrow [5], em tunelamento de spins em interfaces ferromagnética/supercondutora, e também nos primeiros experimentos feitos por Julliere na década de 1970 [6]. No caso da pesquisa teórica, a origem da spintrônica pode ser definida, pelo menos no que diz respeito à proposta teórica de um transistor de spin de efeito de campo por Datta e Das, em 1990 [1].

Como dito no início dessa seção, a eletrônica clássica se preocupa e baseia seus cálculos, na carga dos elétrons. Já a spintrônica se fundamenta no "movimento de rotação", chamado spin, do elétron. Os elétrons podem "girar" nos dois sentidos. Esse "movimento" gera uma espécie de campo magnético ao redor do elétron.

Esta é a razão pela qual uma das primeiras áreas da computação a se beneficiar da spintrônica foi a de armazenamento de dados, fortemente dependente do magnetismo.

De modo geral, descobriu-se que manipulando os sentidos dos spins dos elétrons para alinhar os campos magnéticos - por meio da alternância de camadas de materiais ferromagnéticos, isolados por uma camada não magnética, era possível reduzir a resistência entre as camadas, reduzindo também o espaço entre elas.

Essa descoberta foi empregada nos dispositivos leitores dos discos rígidos, possibilitando aumentar a capacidade dos dispositivos de armazenamento e ao mesmo tempo reduzir suas dimensões.

É na spintrônica que está a base das memórias MRAM (Magnetoresistive Random

Access Memory), ainda não comercializadas. Elas serão capazes de congelar as atividades em andamento em um computador quando ele é desligado e recuperá-las quando ele é religado - ao contrário das memórias RAM atuais, que perdem os dados armazenados toda vez que o computador é desligado e por isso precisam passá-los para o HD e recuperá-los a cada reinicialização.

Obviamente, os mecanismos que permitem a manipulação dos spins, são fundamentais. Entre eles, estão duas formas de interações spin órbita conhecidas.

1.0.2 Tunelamento Ressonante

A possibilidade de uma partícula atravessar uma região proibida, ou seja, uma região na qual apresenta velocidade imaginária (pelo fato de ter energia mecânica menor que sua energia potencial), serve para introduzir o conceito de *tunelamento*. O tunelamento tem, nos últimos anos, servido para explicar uma série de fenômenos que, sem essa possibilidade, se tornariam problemas insolúveis. No caso de aplicações tecnológicas, o sistema de dupla barreira, por apresentar um mecanismo mais eficiente na transmissão, torna-se mais interessante para uso. A presença de níveis discretos na região do poço, introduz picos de transmissividade para valores de energia que são próximos às energias desses níveis discretos. No limite em que as espessuras das barreiras crescem, os picos de transmissividade passam a coincidir com as energias dos níveis discretos dentro do poço isolado. Já para uma camada de largura infinita, a transmissividade em barreira simples daria um resultado nulo.

São três os passos necessários para se calcular a transmissividade:

a) Para cada região de potencial constante, resolve-se, separadamente, a equação de Schroedinger para dado valor de energia fixo. As soluções são do tipo ondas planas $e^{\pm ikz}$, onde k é o vetor de onda, real na região do poço e imaginário na região das barreiras;

b) escreve-se a função de onda total de cada região como sendo uma combinação linear das soluções obtidas no item anterior;

c) utilizam-se as devidas condições de contorno (ou continuidade), em cada inter-

face, obtendo-se um sistema de equações. Tal sistema pode então ser resolvido para se determinar os vários coeficientes dinâmicos do problema.

Num caso simples, o módulo quadrado da razão entre os coeficientes da onda transmitida e o coeficiente da onda incidente nos dá a transmissividade da partícula $T = T(E)$.

Tunelamento Ressonante em Dupla Barreira

Passaremos ao caso de uma dupla barreira, inicialmente suposta simétrica a fim de simplificação na explicação.

Sejam as larguras das barreiras iguais, $L_{B1} = L_{B2} = 2b$, separadas entre si por um poço de largura $L_W = a$, sendo o W devido ao inglês Well = poço.

Na região do poço, o sistema gera naturalmente níveis discretos, também chamados de estados *quase ligados*, assim denominados devido ao tempo de vida (de permanência) τ de uma partícula nesse estado, caso, para lá, seja levada por algum estímulo. Esse tempo de vida, devido ao Princípio da Incerteza, alarga o nível de energia por um fator da ordem de $\Delta E \propto \frac{1}{\tau}$.

Quando a partícula incidente tem a mesma energia de um desses estados ligados, a curva de transmissividade apresenta um máximo de valor unitário $T(E = E_n) = 1$; neste caso dizemos, então, que ocorreu um tunelamento ressonante. A análise das expressões matemáticas para esse caso mostram claramente que o cálculo da transmissividade não depende da posição das barreiras, e sim dos módulos dos vetores de onda k e q , nas regiões do poço e barreira, respectivamente, além da largura de cada região.

Da Fig.(1.1), observa-se que os coeficientes A' e F , que descrevem uma onda que se propaga para a direita, correspondem aos coeficientes de saída da barreira da esquerda e de entrada na barreira da direita, na mesma região do poço, respectivamente. Seus valores devem diferir, no máximo, por uma fase. Da mesma forma G e B' correspondem aos coeficientes de uma onda que se desloca para a esquerda. Sem entrarmos em detalhes

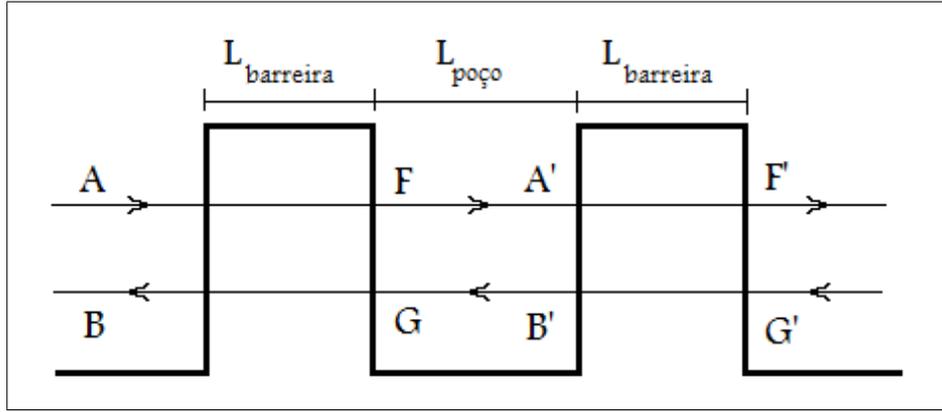


Figura 1.1: Esquema de uma dupla barreira, onde estão mostrados os coeficientes de entrada e saída das duas barreiras.

matemáticos, obtemos como resultado para a transmissividade, uma expressão, da forma

$$T(E) = \frac{1}{1 + f \{\cos^2 [2(ka + \theta)]\}}. \quad (1.1)$$

Verifica-se facilmente que a ressonância ocorre para os casos $\cos(ka + \theta) = 0$, exatamente as situações em que

$$ka + \theta = (2n + 1) \frac{\pi}{2}. \quad (1.2)$$

Condição idêntica é obtida no cálculo dos autovalores de um poço de potencial finito de largura a . Em outras palavras, as barreiras funcionam como uma cavidade óptica, refletindo as diversas ondas de de Broglie no interior do poço. Somente na condição de interferência construtiva, exatamente a que a expressão acima satisfaz, é que ocorre o tunelamento ressonante. Nesses casos o comprimento de onda é tal que $\lambda k = 2\pi$.

Já no caso de barreiras assimétricas, verifica-se a impossibilidade de picos com valores unitários [8]. Cada barreira irá apresentar, individualmente, uma transmissividade diferente da outra. Tal diferença introduz uma diferença de fase entre as ondas no interior da "cavidade", que tende a diminuir à medida em que se diminui a diferença entre as larguras das barreiras. Trataremos tal caso com mais detalhes posteriormente.

Nesse primeiro capítulo, foi discutido o efeito do tunelamento de uma forma que o conceito de ressonância aparecesse de forma natural. No entanto, o sistema de duas barreiras tem interesse comercial, uma vez que, pode vir a ser utilizada na construção de filtros de spins ou dispositivos semelhantes. Para esses casos, a presença de interações do tipo spin órbita pode alterar as propriedades desses sistema. A quebra de degenerescência em algumas bandas, provocada por tais interações, permite uma transmissividade de forma independente de spins diferentes, criando naturalmente faixas de energia na qual apenas um tipo de portador de spin pode tunelar.

Os primeiros estudos de tunelamento de elétrons em heteroestruturas (no caso *GaAs*/*GaAlAs*) foram desenvolvidos por Ezaki e Tsu [9] em 1973, em laboratórios da IBM. Uniu-se as duas barreiras através de eletrodos *GaAs* dopados com tipo n^+ (tanto no emissor quanto no coletor) para logo em seguida aplicar um campo elétrico. O campo elétrico deforma o perfil do potencial, fazendo com que a corrente fluísse entre os dois eletrodos. Tal experimento foi o primeiro a demonstrar a quantização de energia em heteroestruturas semicondutoras. Em tal trabalho, uma resistência diferencial negativa se mostrou presente na curva $V \times I$. Ela foi explicada por Ezaki por meio da conservação de momento do elétron no plano das camadas. Num processo deste tipo, a conservação de energia é condição necessária, mas não suficiente para a ocorrência do tunelamento. O nível do poço requer elétrons com momento linear $\vec{p} = \hbar\vec{k}_{\parallel}$ no plano $x - y$. Portanto, a conservação de energia implica na conservação do momento paralelo, para que ocorra o alinhamento necessário entre o nível do poço com o nível de Fermi na região do emissor. Quando ocorre o desalinhamento, a conservação do momento cessa, produzindo uma queda brusca na corrente que, por sua vez, aparece como uma resistência diferencial negativa.

1.0.3 Hamiltonianos de Dresselhaus e Rashba

Neste trabalho vamos nos deter em duas interações deste tipo: a interação spin órbita de Dresselhaus e a interação de Bychkov-Rashba.

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

P121pt

Pacobahyba, Luiz Henrique.

Propriedades de transporte de spins polarizados em heteroestruturas semicondutoras / Luiz Henrique Pacobahyba. -- São Carlos : UFSCar, 2012.
95 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2009.

1. Física da matéria condensada. 2. Transporte de spins polarizados. 3. Spintrônica. 4. Tunelamento ressonante. I. Título.

CDD: 530.41 (20^a)

A interação spin-órbita de Bychkov-Rashba deve-se a uma quebra de simetria espacial da heteroestrutura (SIA - Structure Inversion Asymmetry), provocada pela aplicação de um campo elétrico externo ou ainda pela quebra de simetria oriunda da diferença entre as dimensões das camadas formadoras do sistema (barreira assimétrica). Tal acoplamento, que ocorre no plano perpendicular à corrente, e é responsável por uma transmissividade dependente do spin, e pode ser relevante em duplas ou triplas barreiras assimétricas.

No caso de barreiras simétricas, o Hamiltoniano de Kane que descreve o sistema, possui ele próprio uma simetria de inversão, que por sua vez é quebrada pela introdução do termo de Rashba.

Já o termo de Dresselhaus tem sua origem numa assimetria estrutural intrínseca ao material que constitui a camada (BIA - Bulk Inversion Asymmetry). Compostos com estrutura *zincblend*, que é a estrutura do diamante, porém com dois átomos compondo a base, apresentam tal assimetria.

O tema desta tese surgiu de uma observação desprezenciosa em sala de aula, de que a maioria dos trabalhos publicados envolvendo interações spin órbita, em especial as que geram os Hamiltonianos de Rashba e Dresselhaus (esses dois mecanismos são apontados como responsáveis pelo aparecimento de um *spin-splitting* à campo nulo [10]-[11]), tratarem, quase sempre, deste último em sua forma “truncada”. Esse fato nos levou a perguntar o porque de tal tratamento.

Outro ponto intrigante era a justificativa de que, para energias pequenas dos elétrons incidentes, comparadas à altura da barreira, poderia-se desprezar certos termos do Hamiltoniano. Tal afirmação se mostrava insegura. A justificativa pode até se mostrar correta, mas carece de radier uma vez que as constantes envolvidas, Rashba e Dresselhaus, são originalmente pequenas, dificultando, portanto, a determinação de um limite aceitável do que é ou não pequeno, do que pode ou não ser desprezado.

Como exemplo, temos que Schlieman e colaboradores [12] propuseram um transistor cujas constantes de Rashba e Dresselhaus ao serem manipuladas poderiam inibir a interação spin órbita em fios quânticos e duplas barreiras. O efeito da interação spin

órbita de Rashba, seja devido a estrutura intrínseca da heteroestrutura ou aplicação de campos elétricos externos, no transporte de spin polarizados tem sido investigado em heteroestruturas não magnéticas onde tem sido reportado que a *spin* polarização atinge de 40% a 50% com moderados campos elétricos [21]-[23]. Já Perel *et. al.* [13], trabalhando com barreira simples e não magnéticas com fraca simetria de inversão espacial, e apenas com o Hamiltoniano de Dresselhaus, obteve importantes informações do comportamento da componente planar do spin com respeito à componente transversal do momento, obtendo eficiência da ordem de 20%. Em ambos os casos os termos de Dresselhaus se apresentaram na sua forma mais simples, ou seja, apenas o termo de primeira ordem, normalmente chamado de "truncado".

Mais recentemente K. Gnanasekar e K. Navaneethakrishnan [14] investigaram o tunelamento de spins polarizados em dupla barreiras assimétricas de *InAs/GaSb/InAs/GaSb/InAs* como função da energia dos elétrons incidentes usando um modelo que inclui o efeito combinado do termo de Dresselhaus linear e Rashba. No modelo proposto o tunelamento dependente de spin através da dupla barreira é descrita diagonalizando o Hamiltoniano para $\varphi = \frac{\pi}{4}$ (ângulo polar do vetor de onda k no plano das camadas) permitindo desacoplar os estados de spin. Usando esse modelo os autores encontram uma eficiência de polarização entre 75 – 85% o que sugere que heteroestruturas de dupla barreiras assimétricas de *InAs/GaSb* podem ser usadas para a fabricação de filtro de spins.

Já G.E. Marques e colaboradores [17] ao estudar a dupla barreira sob o Hamiltoniano completo de Dresselhaus, deixou em aberto algumas possibilidades que exploraremos nesse trabalho.

Neste trabalho, analisa-se a influência dos Hamiltonianos de Bychkov-Rashba e Dresselhaus (esse em sua forma completa), para calcularmos a transmissividade, a eficiência de polarização e a densidade de corrente, para um fluxo de spins polarizados através de heteroestruturas semicondutoras ressonantes simétricas e não simétricas.

Para tais cálculos utilizamos a técnica de Matriz de Espalhamento na aproximação

de massa efetiva.

Tal escolha, quando comparada a outras técnicas (Pseudo-potencial [29] ou *Tight-binding* [30], por exemplo) se deve a alguns fatores: a) é uma técnica versátil que permite uma futura inclusão de outros potenciais, para uma continuidade futura desse trabalho; b) Em geral possui soluções analíticas, diminuindo consideravelmente o tempo computacional.

Explicando de forma simples, o método de matriz de espalhamento consiste em relacionar as amplitudes da onda incidente, com os da onda transmitida. A forma da relação se dá através de uma equação matricial.

Os passos necessários para a aplicação da técnica podem ser descritos da seguinte forma: Resolve-se a equação de massa efetiva em cada região da heteroestrutura, determinando-se, para cada uma delas, suas auto-energias e autofunções. A partir de determinado valor de energia e momento transversal \mathbf{k}_{\parallel} , montamos combinações lineares dessas funções de onda e aplicamos as condições de contorno pertinentes em cada interface, gerando-se dessa forma uma matriz que relaciona as amplitudes na região de entrada da onda (chamada de emissor) com aqueles da região de saída (coletor). Uma vez determinados tais amplitudes, o coeficiente de transmissão (ou a transmissividade) é obtida através da razão entre as amplitudes da onda incidente pela onda transmitida.

Nosso objetivo, neste trabalho, é estudar a transmissividade de elétrons polarizados no tunelamento ressonante em heteroestruturas semicondutoras não magnéticas de barreiras duplas simétricas, usando-se a técnica da matriz de espalhamento [41], na aproximação de massa efetiva do modelo de Rashba- Dresselhaus para a interação spin órbita. O termo de Rashba como já comentamos, é introduzido pela assimetria nas barreiras (gerada pela aplicação do campo elétrico externo) e o termo de Dresselhaus (assimetria de inversão no *Bulk*) é considerado em sua forma completa. A interação spin órbita acopla estados de spin e o movimento dos elétrons de condução no plano perpendicular a direção de crescimento que abre a possibilidade de polarizar, manipular e detectar spins para moderados campos elétricos.

A estrutura dessa tese foi assim definida:

(a) No capítulo I faremos uma introdução e falaremos um pouco sobre a spintrônica e sobre nossa motivação;

(b) No capítulo II, discutiremos o Modelo de Massa Efetiva, inicialmente para um sistema de uma banda e posteriormente para um sistema de múltiplas bandas, além do modelo aplicado em heteroestruturas;

(c) No capítulo III, iniciaremos tratando o método $\mathbf{K} \cdot \mathbf{p}$ e em seguida faremos uma breve discussão sobre as interações spin órbita de nosso interesse: Os termos de Dresselhaus e Rashba;

(d) O capítulo IV, será destinado para a apresentação do formalismo usado nesta tese. Apresentaremos a solução para a Equação de Massa Efetiva, calcularemos as autoenergias do Hamiltoniano, discutiremos a natureza das soluções encontradas para \mathbf{k}_z , o método da matriz de espalhamento e, por fim, apresentaremos a transmissividade dependente do spin.

Todos os cálculos do quarto capítulo são baseados nas formas completas dos Hamiltonianos de Bychkov-Rashba e Dresselhaus.

(e) No capítulo V, apresentaremos a transmissividade de spins polarizados, como função de vários parâmetros, em heteroestruturas de dupla barreira do tipo *InAs/GaSb*, além de discutirmos todos os resultados. Calcularemos ainda a eficiência de polarização do sistema estudado e discutiremos os resultados obtidos;

(f) No capítulo VI, calcularemos a corrente de spins polarizados como função da voltagem aplicada, além de uma análise detalhada dos resultados;

(g) Por fim, no último capítulo, apresentaremos nossas conclusões e perspectivas futuras.

Capítulo 2

Aproximação de Massa Efetiva

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

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

Quando deseja-se tratar o problema de um potencial externo $V(\mathbf{r})$ superposto ao potencial cristalino $U(\mathbf{r})$, o Hamiltoniano do cristal

$$\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

onde m_0 é a massa do elétron livre e p o momento linear, possui autovalores $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ que são funções bastante complicadas do vetor de onda \mathbf{k} dentro da primeira zona de Brillouin, onde n é o índice que classifica esta função em várias bandas de energia. Em

determinadas situações é possível e desejável substituir o Hamiltoniano do cristal perfeito \mathcal{H}_0 por um operador energia cinética efetivo $T_{eff} = \frac{p^2}{2m^*}$, onde m^* é agora a massa efetiva que incorpora toda a informação do potencial cristalino $U(\mathbf{r})$. Impõe-se porém que os autovalores do operador \mathcal{H}_0 sejam iguais ao do operador T_{eff} , nas proximidades da extremidade da banda, k_0 . Dessa forma o movimento do elétron no cristal sujeito a um potencial externo adicional torna-se mais simples, pois deve-se encontrar a solução de

$$[T_{eff} + U(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = \mathbf{E}. \quad (2.2)$$

2.1 Aproximação de Massa Efetiva - Modelo de uma banda

Considere um cristal infinito com uma banda isolada, cuja extremidade está no ponto $\mathbf{k}_0 = 0$. A equação de Schroedinger que descreve o movimento dos elétrons nessa banda é dada por:

$$\mathcal{H}_0 \psi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \psi_k(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

onde

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

é o Hamiltoniano do cristal perfeito, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ é o operador momento linear, $\varepsilon(\mathbf{k})$ é a energia do elétron em cada estado rotulado pelo índice \mathbf{k} . Em 1928, F. Bloch [24] demonstrou o importante teorema que afirma que, a solução de Schroedinger para um potencial periódico, Eq.(2.3) deve ter a forma especial:

$$\psi_k(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_k(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

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

A função de Bloch $\psi_k(\mathbf{r})$ pode ainda ser escrita como combinação linear das funções de Wannier $a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ associada a cada um dos N sítios \mathbf{R}_j da rede de Bravais e que satisfazem a relação de ortogonalidade [24]:

$$\int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r} = \delta_{ij}. \quad (2.6)$$

Desta forma temos:

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (2.7)$$

Da Eq.(2.7), observa-se que a função de Wannier é a transformada de Fourier inversa da função de Bloch, portanto invertendo a Eq.(2.7) obtém-se

$$a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \psi_k(\mathbf{r}). \quad (2.8)$$

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

$$V_{ij} \equiv \int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) V(\mathbf{r}) a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r} \cong V(\mathbf{R}_i) \delta_{ij}. \quad (2.9)$$

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

$$[\mathcal{H}_o + V(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (2.10)$$

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

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N F(\mathbf{R}_j) a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (2.11)$$

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

Substituindo a Eq.(2.11) na Eq.(2.10) e projetando o resultado em um elemento da base de Wannier obtemos

$$\sum_j \left[(\mathcal{H}_0)_{ij} + V_{ij} \right] F(\mathbf{R}_j) = EF(\mathbf{R}_j), \quad (2.12)$$

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

$$(\mathcal{H}_0)_{ij} \equiv \int a^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \mathcal{H}_0 a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}, \quad (2.13)$$

os elementos de matriz do Hamiltoniano do cristal perfeito, \mathcal{H}_0 , na base de Wannier. Podemos ainda escrever

$$(\mathcal{H}_0)_{ij} = \mathcal{H}_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j), \quad (2.14)$$

uma forma que expressa a invariância translacional de \mathcal{H}_0 .

Desta maneira, a Eq.(2.12) torna-se

$$\sum_j \mathcal{H}_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) F(\mathbf{R}_j) + V(\mathbf{R}_i) F(\mathbf{R}_i) = EF(\mathbf{R}_i), \quad (2.15)$$

que é exata, exceto pela aproximação indicada na Eq.(2.9).

Como temos N sítios, a Eq.(2.15) é equivalente a um sistema de N equações relacionadas as N incógnitas $F(\mathbf{R}_j)$. Considerando o fato de que as funções envelopes variam fracamente com a posição e admitindo que as mesmas sejam obtidas dos valores de uma função contínua $F(\mathbf{r})$ para cada sítio, $\mathbf{r} = \mathbf{R}_j$, podemos expandir as quantidades $F(\mathbf{R}_j)$ em série de Taylor em torno do sítio \mathbf{R}_i . Assim sendo obtém-se

$$F(\mathbf{R}_j) = \left[1 + (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) \cdot \nabla + \frac{(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)^2}{2!} \nabla^2 + \dots \right] F(\mathbf{R}_i), \quad (2.16)$$

ou,

$$F(\mathbf{R}_j) = e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} F(\mathbf{R}_i), \quad (2.17)$$

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

Substituindo a Eq.(2.17) na Eq.(2.15) obtém-se

$$\sum_j \mathcal{H}_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} F(\mathbf{R}_i) + V(\mathbf{R}_i) F(\mathbf{R}_i) = EF(\mathbf{R}_i). \quad (2.18)$$

Por outro lado, levando a Eq.(2.7) na Eq.(2.3), e projetando o resultado em um elemento $a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ da base de Wannier e utilizando a Eq.(2.14), encontram-se

$$\sum_j \mathcal{H}_0(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} = \varepsilon(\mathbf{k}). \quad (2.19)$$

Usando agora este último resultado na Eq.(2.18), obtém-se:

$$\varepsilon(-i\nabla) F(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}). \quad (2.20)$$

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

Como acontece na maioria dos problemas tratados nesta aproximação é suficiente expandir-se $\varepsilon(\mathbf{k} \rightarrow i\nabla)$ até termos da ordem k^2 , para pontos próximos ao extremo da banda k_0 . Assim, a Eq.(2.20), que é conhecida como equação de massa efetiva, torna-se semelhante à equação de Schrödinger para uma partícula no espaço livre sujeita ao potencial externo $V(\mathbf{r})$, mas com o operador energia cinética efetivo (até a ordem de k^2), da forma

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = T_{eff}, \quad (2.21)$$

onde m^* , conhecida como massa efetiva da partícula - daí o nome da aproximação - contém todas as informações relevantes do potencial periódico. De maneira análoga,

podemos interpretar $F(\mathbf{r})$ como as autofunções do elétron naquele potencial.

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

$$\Psi(\mathbf{r}) \cong F(\mathbf{r}) u_0(\mathbf{r}). \quad (2.22)$$

Para isto, vamos expandir a função de onda $\Psi(\mathbf{r})$ dada na Eq.(2.11) na base das funções de Bloch, usando a Eq.(2.8), isto é,

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j,\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} F(\mathbf{R}_j) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.23)$$

Definindo:

$$G(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} F(\mathbf{R}_j), \quad (2.24)$$

a Eq.(2.23) pode ser reescrita como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.25)$$

Utilizando-se então a função de Bloch $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ dada na Eq.(2.5), podemos rrescrever a equação acima como

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

Como as funções envelopes $F(\mathbf{R}_j)$ variam muito pouco dentro da célula unitária, podemos escrever, com uma boa aproximação, a Eq.(2.24) na forma

$$G(\mathbf{k}) \cong \frac{1}{\sqrt{N}} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.27)$$

Desta equação, podemos verificar que $G(\mathbf{k})$ é a transformada de Fourier de $F(\mathbf{r})$, e como $F(\mathbf{r})$ tem uma fraca dependência com a posição no espaço real, $G(\mathbf{k})$ é bem

concentrada no espaço recíproco \mathbf{k} , ou seja, $G(\mathbf{k})$ tem valores apreciáveis somente para $\mathbf{k} \approx 0$. Sendo assim, podemos substituir $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow u_0(\mathbf{r})$ na Eq.(2.26), para obtermos

$$\Psi(\mathbf{r}) \cong u_0(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} G(\mathbf{k}) \right] u_0(\mathbf{r}). \quad (2.28)$$

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

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} G(\mathbf{k}), \quad (2.29)$$

podemos reescrever a Eq.(2.28) na forma

$$\Psi(\mathbf{r}) \cong F(\mathbf{r})u_0(\mathbf{r}), \quad (2.30)$$

obtendo assim o resultado desejado.

Como vimos da Eq.(2.20) a aproximação de massa efetiva para o modelo de uma banda corresponde a substituição do efeito do potencial cristalino $U(\mathbf{r})$, através do operador energia cinética efetivo T_{eff} que produz na vizinhança de \mathbf{k}_0 , soluções idênticas às do cristal. Uma situação mais complexa ocorre quando existem várias bandas v acopladas com extremidades no ponto $\mathbf{k}_0 = 0$. Nessa situação a equação de massa efetiva, Eq.(2.20), pode ser generalizada numa forma matricial de dimensão $(N \times N)$ onde N é o número de bandas, isto é:

$$\sum_{\nu} \{ \mathcal{H}_{\mu\nu}^0(\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla) + V(\mathbf{R}_i) \delta_{\mu\nu} \} F_{\nu}(\mathbf{R}_i) = EF_{\mu}(\mathbf{R}_i). \quad (2.31)$$

De forma análoga à Eq.(2.30), podemos mostrar que a função de onda, $\Psi(\mathbf{r})$, do sistema perturbado e a função de Bloch no extremo para um sistema multibandas pode ser escrita como

$$\Psi(\mathbf{r}) \simeq \sum_{\nu} F_{\nu}(\mathbf{r}) u_{\nu 0}(\mathbf{r}). \quad (2.32)$$

2.2 Aproximação de Massa Efetiva em Heteroestruturas

Considere uma heteroestrutura composta por dois semicondutores diferentes A e B , ambos com estrutura *zincblend*, crescidos na direção z . A técnica mais utilizada no crescimento desses sistemas são a Epitaxial por Feixe Molecular (MBE-Molecular Beam Epitaxy) e "Metal-Organic Chemical Vapour Deposition" (MOCVD), que permite obter interfaces de alta qualidade entre cada material na escala de uma camada atômica ($\sim 2,8 \text{ \AA}$) [31]. Com uma boa aproximação, consideramos que as interfaces entre os semicondutores diferentes sejam bidimensionais, o que implica que os vetores de onda $k_{\parallel} = (k_x, k_y)$ são bons números quânticos (são conservados através da interface) para o sistema.

Nas próximas considerações desprezaremos a formação de dipolos devido a acumulação de cargas nas interfaces e consideramos o movimento dos elétrons em camadas isoladas como aproximadamente igual ao do cristal perfeito formado por aquele material, independentemente das condições de contorno que as funções envelopes devam satisfazer. Esta aproximação é conhecida como aproximação de banda plana.

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

$$\delta E_c + \delta E_v = \delta E_g, \quad (2.33)$$

onde δE_c e δE_v medem respectivamente a descontinuidade das bandas de condução e de valência no ponto Γ . Desta forma, crescendo uma heteroestrutura com uma sequência de camadas alternadas $ABAB\dots$, os portadores, nesses materiais (elétrons), estarão sujeitos a um perfil de potencial consistindo de poços e barreiras alternadas, semelhante ao problema de uma partícula em um potencial unidimensional. Entretanto, outras formas de interfaces são possíveis variando de forma controlada a composição dos materiais e que permitiria obter estruturas diversas como: poços quânticos com potenciais triangulares e parabólicos.

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

$$\sum_{\nu} [\mathcal{H}_{\mu\nu}^{(j)}(K \rightarrow -i\nabla) + V(\mathbf{r})\delta_{\mu\nu}] F_{\nu}(\mathbf{r}) = EF_{\mu}^{(j)}(\mathbf{r}), \quad (2.34)$$

com $j = A$ ou B e então estabelecer condições de contorno (continuidade) que as funções envelopes devam satisfazer nas interfaces. A função de Bloch, em cada camada, toma a forma [24]

$$\Psi^{(j)}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} F_{\nu}^{(j)}(\mathbf{r})u_{\nu 0}^{(j)}(\mathbf{r}). \quad (2.35)$$

Para determinarmos os autovalores e autofunções devemos agora especificar as condições de contorno (continuidade) para as funções envelopes. Para isto, usamos o fato de que $\Psi^{(j)}(\mathbf{r})$ deve ser contínua em todo o sistema. Entretanto, essa condição não é suficiente para relacionar as funções envelope diretamente, como pode ser visto claramente da Eq.(2.35), sendo necessário o conhecimento das funções de Bloch $u_{\nu 0}^{(j)}(\mathbf{r})$ em cada material, o que extrapola o domínio da aproximação de massa efetiva.

Neste trabalho, estamos interessados no estudo das propriedades de transporte em heteroestrutura do tipo I , onde as regiões de confinamento dos portadores (elétrons) ocorrem no mesmo material. Como ambos os materiais, que formam a heteroestrutura, apresentam o *gap* direto no ponto Γ ($k_0 = 0$), admitiremos que as componentes da função de Bloch u_0 sejam iguais em todas as regiões, isto é:

$$u_{\nu 0}^{(A)} = u_{\nu 0}^{(B)}, \quad (2.36)$$

o que restringe a aplicação do método a heteroestruturas formadas com materiais com mesma estrutura cristalina [32].

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

$$F_\nu^{(A)}(\boldsymbol{\rho}, z_i) = F_\nu^{(B)}(\boldsymbol{\rho}, z_i), \quad (2.37)$$

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

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

$$F_\nu^{(j)}(\boldsymbol{\rho}, z) = \exp(i\mathbf{k}_\rho \cdot \boldsymbol{\rho}) F_\nu^{(j)}(z), \quad (2.38)$$

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

$$[H^{(j)}(k_z \rightarrow i\partial/\partial z) + \mathbf{IV}(\mathbf{r})]\mathbf{F}^{(j)}(z) = E\mathbf{F}^{(j)}(z). \quad (2.39)$$

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

$$\mathbf{J}_z \mathbf{F}_\nu^{(A)}(z_i) = \mathbf{J}_z \mathbf{F}_\nu^{(A)}(z_i), \quad (2.40)$$

onde \mathbf{J}_z é o operador densidade de corrente que será definido posteriormente.

Uma vez obtida a equação de massa efetiva que descreve o movimento dos portadores (elétrons) em heteroestruturas semicondutoras o passo seguinte é escolher o melhor Hamiltoniano para descrever adequadamente as propriedades do cristal perfeito visando a obtenção de bons resultados, uma vez que, estamos interessados no efeito de spin órbital. Para isto, optamos pelos modelos de Dresselhaus em sua forma completa e Rashba para investigarmos a transmissividade de elétrons, na aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

Capítulo 3

Modelos de Dresselhaus e Rashba

Para compreendermos as propriedades eletrônicas em heteroestruturas semicondutoras sujeitas a interações spin órbita, torna-se essencial um modelo razoável para calcularmos a estrutura eletrônica. Vários formalismos tem sido utilizados no cálculo da estrutura eletrônica, como a aproximação *Tight-Binding* [30], *Pseudopotenciais* [29], etc.. Além da complexidade inerente de cada um deles, os altos custos computacionais podem limitar a utilização prática dos mesmos a um grupo reduzido de locais com infraestrutura computacional necessária. Em vista dessas dificuldades, nessa tese optamos pelo Hamiltoniano completo de Rashba-Dresselhaus, baseado no método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para descrever as propriedades de transporte de spins polarizados em dupla barreira assimétrica, uma vez que o mesmo é de fácil adaptação ao esquema de massa efetiva.

Nesse capítulo, apresentamos, de forma qualitativa, o modelo de Rashba e Dresselhaus na aproximação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para o cálculo da transmissividade de elétrons polarizados da banda de condução em heteroestruturas de dupla barreira. Inicialmente será feita uma descrição do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, método este muito utilizado para o estudo de bandas em semicondutores que descrevem o movimento do elétron no cristal perfeito em sua representação com interação spin órbita. Em seguida apresentamos o Hamiltoniano de Dresselhaus que considera o acoplamento spin órbita em sua forma completa, gerado a partir da assimetria de inversão espacial no *bulk* (BIA) e será tratado neste capítulo,

assim como o Hamiltoniano de Rashba (SIA) introduzido pela assimetria de inversão espacial no sistema.

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

Desenvolvido por Bardeen e Seitz [26], o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, que inicialmente era utilizado para a determinação de massa efetiva e as funções de onda [28] próximas a pontos de simetria no espaço- k , restritos a uma única banda.

Atualmente, tal método pode ser considerado rigoroso para a determinação empírica de estruturas de bandas, além de permitir aproximações em casos de interesse.

Em linhas gerais, o procedimento básico para o cálculo de bandas através do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ possui três etapas:

- (i) Transformação do Hamiltoniano do cristal para uma representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$;
- (ii) Redução ao problema matricial de autovalores, usando como base as funções de onda no ponto \mathbf{k}_0 para se obter formalmente a matriz do passo anterior;
- (iii) Introduzir aproximações, visando a utilização prática desses resultados.

Normalmente, em semicondutores, a localização dos portadores de cargas, usualmente ocorrem próximos à extremidade das bandas. Isso contribui ainda mais para a simplificação dos cálculos, uma vez que, para a maioria dos casos, nos restringimos à uma pequena região do espaço- k , vizinhas à esses extremos, tornando o método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ainda mais atraente para aplicações nesses materiais.

Na aproximação de partículas independentes, a função de onda de um portador no cristal semiconductor é obtida resolvendo a equação de Schroendinger para as funções de Bloch $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{v\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ em um potencial periódico cristalino $V_0(\mathbf{r})$

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{v\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_v(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{v\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

onde m_0 é a massa de um elétron livre, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ o operador momento, $u_{v\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é a parte periódica da função de Bloch e v indica o índice da banda. Aplicando o operador

momento na função de Bloch, obtemos facilmente a equação de Schroendinger apenas para a parte periódica $|\nu\mathbf{k}\rangle$ das funções de Bloch

$$\mathcal{H}(k)|\nu\mathbf{k}\rangle = E_n(\mathbf{k})|\nu\mathbf{k}\rangle, \quad (3.2)$$

onde definimos, o Hamiltoniano

$$\mathcal{H}(k) = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right], \quad (3.3)$$

como a representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ do Hamiltoniano $\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m_0} + U(\mathbf{r})$. Portanto

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right] |\nu\mathbf{k}\rangle = E_v(\mathbf{k}) |\nu\mathbf{k}\rangle. \quad (3.4)$$

Na maioria dos semicondutores, porém a interação spin órbita é muito importante, sendo fundamental para comparações com resultados experimentais, uma vez que, níveis inicialmente degenerados, podem ser desdobrados com a presença desta interação, resultando num espectro muito diferente daquele, sem essa interação. Esta interação que provém da perturbação que o spin do elétron sofre devido ao campo magnético provocado pela sua órbita em torno, tem a forma

$$\mathcal{H}_{SO} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}. \quad (3.5)$$

$\nabla U(\mathbf{r})$ sendo o gradiente do potencial cristalino e σ representa as matrizes de Pauli com componentes

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

Ao levarmos em consideração a interação spin órbita a parte periódica da função de Bloch passa a ser um spinor de duas componentes $|\nu\mathbf{k}\rangle$ e a equação de Schroendinger na

representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ toma a forma

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times (\nabla V_0) \right] |v\mathbf{k}\rangle = E_v(\mathbf{k}) |v\mathbf{k}\rangle, \quad (3.7)$$

sendo

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U. \quad (3.8)$$

Vale ainda ressaltar que o vetor de onda \mathbf{k} comparece na equação de autovalores apenas como parâmetro e podemos concluir que, para cada valor deste parâmetro, particularmente para $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ as funções $u_{v\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ formam um conjunto completo, sendo úteis como base para a formulação do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Sendo assim, supõe-se agora que, $E_n(\mathbf{k}_0)$ e $u_{v\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ são as soluções conhecidas num ponto de referência $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$. Dessa forma, para um determinado valor de vetor de onda \mathbf{k}_0 , o conjunto de funções com periodicidade da rede $\{|v\mathbf{k}_0\rangle\}$ e $\{|n\mathbf{k}_0\rangle\}$, formam um conjunto completo para a base (3.4) e (3.7). Portanto podemos expandir os kets $\{|n\mathbf{k}\rangle\}$ em termos das funções de Bloch no extremo da banda $\{|v0\rangle\}$ vezes os auto-estados de spin $|\sigma\rangle$:

$$|n\mathbf{k}\rangle = \sum_{\substack{v' \\ \sigma'=\uparrow,\downarrow}} c_{nv'\sigma'}(\mathbf{k}) |v'\sigma'\rangle, \quad (3.9)$$

onde $|v'\sigma'\rangle = |v'0\rangle \otimes |0\sigma'\rangle$.

Até o momento temos escolhido deliberadamente como a base, as autofunções de (3.4) sem interação spin órbita, porque é mais fácil tratá-la como uma pequena perturbação. Se multiplicarmos (3.7) pela esquerda por $\langle v\sigma|$ e utilizando a equação de autovalores para $|v\sigma\rangle$, obtemos um problema algébrico de autovalores para a relação de dispersão $E_n(\mathbf{k})$, que depende apenas explicitamente do vetor de onda \mathbf{k}

$$\sum_{v',\sigma'} \left\{ \left[E_{v'}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{vv'} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{vv'\sigma\sigma'} + \Delta_{vv'\sigma\sigma'} \right\} c_{nv'\sigma'}(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}) c_{nv\sigma}(\mathbf{k}), \quad (3.10)$$

onde

$$\mathbf{P}_{vv'\sigma\sigma'} \equiv \langle v\sigma | \pi | v'\sigma' \rangle, \quad (3.11)$$

e

$$\Delta_{vv'\sigma\sigma'} \equiv \langle v\sigma | \left[\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times (\nabla U) \right] | v'\sigma' \rangle. \quad (3.12)$$

Na equação (3.10), os termos fora da diagonal $\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{vv'\sigma\sigma'}$, resultam em uma mistura dos estados na extremidade da banda $|v0\rangle$ que se tornam mais forte para maiores k' s e próximos em energia aos extremos da banda em $k = 0$.

Em geral os termos de interação SO, $\Delta_{vv'\sigma\sigma'}$, resultam em uma separação dos níveis de energia degenerados mesmo em $\mathbf{k} = 0$, e portanto, uma análise mais detalhada requer que levamos em conta as simetrias das bandas. Isso é ilustrado na Fig.(3.1), onde mostramos a estrutura de bandas dos semicondutores que se cristalizam na estrutura *zincblend*. A estrutura de bandas desses semicondutores mostram que os extremos das bandas de condução e de valência ocorrem no ponto Γ ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$), onde se define o *gap* fundamental do semicondutor, E_g . Neste ponto, na ausência de spin, o ramo mais baixo da banda de condução é não degenerada e a banda de valência possui tripla degenerescência. A interação spin órbita quebra parcialmente a degenerescência na banda de valência, separando um dos ramos, conhecido como banda de buraco separado ou *split-off* (SO), dos outros dois que permanecem degenerados no ponto Γ , denominados como bandas de buraco pesado ou *heavy-hole* (HH) e de buraco leve ou *light-hole* (LH).

Análise detalhada da simetria das estruturas *zincblend* revelam que, na ausência de spin, a parte periódica da função de Bloch para a banda de condução é uma função s , indicando que tem propriedades de simetria de um orbital de momento angular $\mathbf{L} = \mathbf{0}$ sob operações de simetria do grupo tetraédrico T_d^2 , esta função $|s\rangle$ pertence ao tipo de simetria Γ_1 (Γ_6 , na presença de spin). O topo da banda de valência é formada por orbitais ligantes tipo p , indicando que as funções de Bloch no topo da banda de valência transformam-se da mesma forma que as funções atômicas $|x\rangle$, $|y\rangle$ e $|z\rangle$, de momento angular $\mathbf{L} = \mathbf{1}$, sob as operações de simetria que pertencem à representação Γ_4 (Γ_7 e Γ_8

na presença de spin).

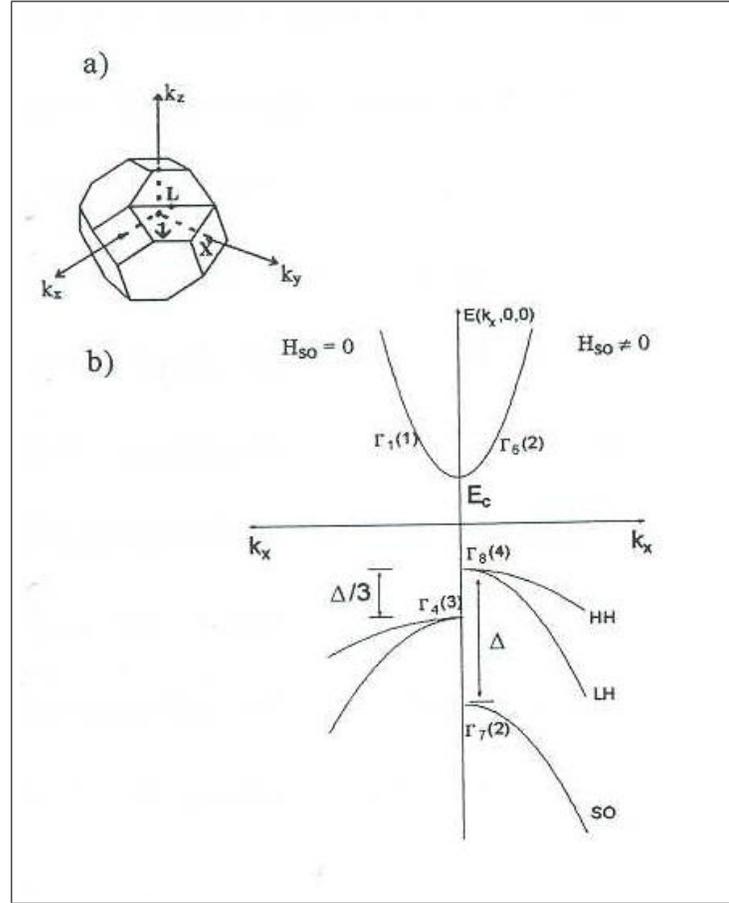


Figura 3.1: Representação esquemática da estrutura de banda dos compostos III-V, na vizinhança do ponto Γ , mostrando a lacuna fundamental (EG) e a energia spin órbita (Δ). Os símbolos Γ_J , referem-se às representações das funções de Bloch sem *spin* (à esquerda) e com *spin* (à direita). Os números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

3.2 Hamiltoniano de Dresselhaus

A diagonalização de (2.39) nos permite obter a expressão exata para a relação de dispersão $E_n(\mathbf{k})$ e os coeficientes de expansão $c_{nv'\sigma'}(\mathbf{k})$ para todos os valores de \mathbf{k} e todos os índices de banda n . No entanto, em muitas aplicações do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, estamos apenas

interessados em algumas bandas adjacentes ($n = 1, \dots, N$), para as quais queremos saber a relação de dispersão apenas em pontos próximos ao ponto de expansão $\mathbf{k}_0 = 0$ (i.e., em pontos onde $|\mathbf{k}| \ll \frac{2\pi}{a}$, onde a é a constante de rede. Portanto, a interação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e spin-órbita são completamente consideradas apenas para aquelas N bandas mais importantes, chamadas de bandas de categoria \mathcal{A} , enquanto as contribuições das bandas mais remotas (categoria \mathcal{B}) são consideradas através da teoria de perturbação de Löwdin com os termos fora da diagonal tomados como pequenas perturbações. Ao contrário da teoria de perturbação ordinária, que tenta diagonalizar um Hamiltoniano, usando somente processo iterativo, no método de Löwdin este esquema é usado apenas parcialmente, com o objetivo de remover as interações, entre os níveis pertencentes a diferentes categorias, \mathcal{A} e \mathcal{B} , em que os estados originais são convenientemente selecionados. Em consequência deste tratamento, as interações entre os estados na mesma categoria \mathcal{A} até segunda ordem de perturbação, tornam-se

$$h_{ij} \simeq h_{ij} + \sum_{\alpha} \frac{h_{i\alpha} h_{\alpha j}}{h_{ii} - h_{\alpha\alpha}}, \{i, j \in \mathcal{A}, \alpha \in \mathcal{B}\}. \quad (3.13)$$

Aplicando este procedimento ao Hamiltoniano na Eq.(3.10) após selecionarmos os estados de condução $\{|s \uparrow\rangle, |s \downarrow\rangle\}$, para a categoria \mathcal{A} (subespaço s), e usando a teoria dos invariantes, obtemos o Hamiltoniano de Dresselhaus na base $\{|s \uparrow\rangle, |s \downarrow\rangle\}$, que pode ser escrito como:

$$\mathcal{H}_D = \alpha_D [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)]. \quad (3.14)$$

Na expressão acima, $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ são as matrizes de spin de Pauli e α_D corresponde ao parâmetro *spin-splitting* de Dresselhaus da banda de condução, sendo uma característica de cada material ou composto. Fazendo as devidas substituições [17], obtemos o seguinte:

$$\mathcal{H}_D^1 = \begin{pmatrix} 0 & \alpha_1(k_{\parallel}, \varphi) k_z^2 \\ \alpha_1^*(k_{\parallel}, \varphi) k_z^2 & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_1(k_{\parallel}, \varphi) = \alpha_D k_{\parallel} e^{i\varphi}, \quad (3.15)$$

$$\mathcal{H}_D^2 = \begin{pmatrix} -\alpha_2(k_{\parallel}, \varphi) k_z & 0 \\ 0 & \alpha_2(k_{\parallel}, \varphi) k_z \end{pmatrix} \quad \alpha_2(k_{\parallel}, \varphi) = \alpha_D k_{\parallel}^2 \cos(2\varphi), \quad (3.16)$$

$$\mathcal{H}_D^3 = \begin{pmatrix} 0 & \alpha_3(k_{\parallel}, \varphi) k_z^2 \\ \alpha_3^*(k_{\parallel}, \varphi) k_z^2 & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_3(k_{\parallel}, \varphi) = \alpha_D k_{\parallel}^3 \frac{[e^{i\varphi} - e^{-i3\varphi}]}{4}, \quad (3.17)$$

que são os termos de ordem linear, quadrático e cúbico. Assim o Hamiltoniano de Dresselhaus em sua forma completa é escrito como:

$$\tilde{\mathcal{H}}_D = \mathcal{H}_D^1 + \mathcal{H}_D^2 + \mathcal{H}_D^3, \quad (3.18)$$

onde os índices 1, 2 e 3 indicam respectivamente, a ordem dos termos lineares, quadrático e cúbico.

Complementando a descrição do nosso modelo, deve-se acrescentar ao Hamiltoniano do sistema, a interação spin órbita de Rashba [16] provocado pela assimetria de inversão espacial na heteroestrutura.

3.3 Hamiltoniano de Rashba

Em heteroestruturas semicondutoras, a degenerescência de spin pode ser quebrada não somente por causa da assimetria de inversão espacial no *bulk* do cristal perfeito (BIA), mas também por causa da assimetria de inversão na estrutura do potencial $V(\mathbf{r})$ de confinamento. Este potencial pode conter um potencial embutido ou um potencial externo, como também um potencial efetivo dependente da posição da extremidade da banda. Recentemente experimentos tem mostrado que o SIA *spin-splitting* pode ser continuamente controlado por um *gate* externo [37, 38].

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

$$V(\mathbf{r}) = V_0 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} + \dots \quad (3.19)$$

isto é, em primeira aproximação, a assimetria de inversão de $V(\mathbf{r})$ pode ser caracterizada por um campo elétrico \mathbf{E} . Desta forma, para baixa ordem em k e \mathbf{E} o SIA *spin-splitting* da banda de condução é dada pelo termo de Rashba [16],

$$\mathcal{H}_R = \beta_0 (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.20)$$

onde β_0 corresponde a um valor médio do coeficiente de Rashba no material do poço e da barreira e pode ser determinado analisando as oscilações de Shubnikov-de Haas [44]-[47]. Considerando o campo elétrico $\mathbf{E} = (\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathcal{E}_0)$ na direção z e usando as matrizes de Pauli obtemos

$$\mathcal{H}_R = \beta_0 \mathcal{E}_0 \begin{bmatrix} 0 & k_- \\ k_+ & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.21)$$

onde $k_+ = k_x + ik_y$, $k_- = k_x - ik_y$. Dessa forma encontramos

$$\mathcal{H}_R = \begin{bmatrix} 0 & \beta_0 \mathcal{E}_0 (k_x + ik_y) \\ \beta_0 \mathcal{E}_0 (k_x - ik_y) & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.22)$$

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

$$\mathcal{H}_R = \begin{bmatrix} 0 & \beta k_{\parallel} e^{i(\pi/2 - \varphi)} \\ \beta k_{\parallel} e^{i(\pi/2 - \varphi)} & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.23)$$

onde $\beta = \beta_0 \mathcal{E}_0$. Com base nos desenvolvimentos efetuados nas seções anteriores, podemos agora escrever nosso Hamiltoniano total, que constitui-se como a somatória dos efeitos

de interação de spin órbita de Rashba e Dresselhaus em sua forma completa

$$\mathcal{H}_T = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_D + \mathcal{H}_R, \quad (3.24)$$

onde \mathcal{H}_c é a parte cinética do Hamiltoniano dada por:

$$\mathcal{H}_{2 \times 2}^c = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \end{bmatrix}. \quad (3.25)$$

Assim sendo, podemos escrever o Hamiltoniano total como

$$\mathcal{H}_T = \begin{bmatrix} \mathcal{H}_{++} & \mathcal{H}_{+-} \\ \mathcal{H}_{-+} & \mathcal{H}_{--} \end{bmatrix}, \quad (3.26)$$

onde

$$\mathcal{H}_{++} = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) k_z^2 + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) k_{\parallel} + \alpha_D k_{\parallel}^2 \cos 2\varphi k_z, \quad (3.27)$$

$$\mathcal{H}_{--} = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) k_z^2 + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) k_{\parallel} - \alpha_D k_{\parallel}^2 \cos 2\varphi k_z, \quad (3.28)$$

$$\mathcal{H}_{+-} = (i\beta k_{\parallel} e^{-i\varphi} - \alpha_D k_{\parallel} e^{i\varphi} k_z^2 + i k_{\parallel}^3 \alpha_D \cos \varphi \sin \varphi e^{-i\varphi}), \quad (3.29)$$

$$\mathcal{H}_{-+} = (i\beta k_{\parallel} e^{-i\varphi} - \alpha_D k_{\parallel} e^{i\varphi} k_z^2 + i k_{\parallel}^3 \alpha_D \cos \varphi \sin \varphi e^{-i\varphi})^*, \quad (3.30)$$

sendo $\mathcal{H}_{+-} = \mathcal{H}_{-+}^{\dagger}$.

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

Capítulo 4

Probabilidade de Transmissão Dependente do Spin

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

A técnica de matriz de espalhamento consiste basicamente em relacionar, via equação matricial, os coeficientes das ondas incidentes e espalhadas na heteroestrutura.

Para se obter tal matriz, é necessária uma série de três etapas, abaixo descritas:

a) Deve-se resolver a equação de massa efetiva, para o cristal perfeito (também chamado de *bulk*), para certa energia, para determinar-se as funções envelopes para cada tipo de partícula. Basicamente, as funções envelopes são as funções de onda da partícula nessa aproximação de massa efetiva. Para obtê-las, é preciso resolver a seguinte equação de autovalores:

$$\mathcal{H}\mathbf{F}(\mathbf{r}) = E\mathbf{F}(\mathbf{r}), \quad (4.1)$$

onde $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ são as funções envelopes, cujas componentes representam os casos de spin *up* e *down*, propagantes e antipropagantes. Dada a simetria cristalina, pode-se escrever $\mathbf{F}(\mathbf{r})$

da seguinte forma:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (4.2)$$

b) Uma vez determinadas as funções envelopes, escreve-se a função de onda total em cada região, como sendo a combinação linear das funções envelopes (ainda para dado valor de energia), mantendo-se fixo para isso, o valor do momento paralelo às camadas, \mathbf{k}_{\parallel} :

$$\mathbf{F}(z) = \sum_{\nu=\uparrow,\downarrow} a_{\nu} \mathbf{F}_{\nu}(\mathbf{k}_{\nu}) e^{ik_z(z-z_n)} + b_{\nu} \mathbf{F}_{\nu}(-\mathbf{k}_{\nu}) e^{-ik_z(z-z_n)}, \quad (4.3)$$

c) como etapa final, usamos as condições de contorno,

$$\begin{cases} \mathbf{F}(z_j)|_{z_j} = \textit{contínuo}, \\ \mathbf{J}_z \mathbf{F}(z_j)|_{z_j} = \textit{contínuo}, \end{cases} \quad (4.4)$$

que são exatamente a continuidade da função de onda e da densidade de corrente. Dessa forma obtém-se a matriz que relaciona os coeficientes das combinações lineares para camadas adjacentes de uma interface, a chamada matriz de espalhamento interfacial. A matriz total de transferência é obtida pela multiplicação das matrizes interfaciais. Vamos detalhar um pouco mais esses procedimentos.

4.1 Solução da Equação de Massa Efetiva

O primeiro procedimento básico para a obtenção da matriz de espalhamento, na aproximação de massa efetiva, é resolver a equação de massa efetiva no cristal perfeito (*bulk*) para um determinado valor de energia E , k_{\parallel} , (momento paralelo) e φ , então, determinam-se as funções envelopes $\mathbf{F}_{\sigma=\uparrow,\downarrow}(k_z, k_{\parallel}, \varphi)$, para cada tipo de polarização \uparrow (*up*), \downarrow (*down*). A equação de massa efetiva no cristal perfeito é dada pela Eq.(4.1), onde o Hamiltoniano total é dado pela Eq.(3.26) e $\mathbf{F}(r) = (F_{\uparrow}, F_{\downarrow})$ são as funções envelopes com duas componentes *up* e *down*.

Substituindo a Eq.(4.2) na Eq.(4.1) obtemos a equação de massa efetiva para os

estados de *spin-up* ou *spin-down*

$$\mathcal{H}\mathbf{F}_\sigma(\mathbf{k}) = E\mathbf{F}_\sigma(\mathbf{k}). \quad (4.5)$$

A Eq.(4.5) pode ainda ser escrita como:

$$(\mathcal{H} - E\mathbf{I})\mathbf{F}_\sigma(\mathbf{k}) = 0, \quad (4.6)$$

que tem solução não trivial quando

$$\det(\mathcal{H} - E\mathbf{I}) = 0 \quad (4.7)$$

$$\begin{bmatrix} \mathcal{H}_{11} & \mathcal{H}_{12} \\ \mathcal{H}_{21} & \mathcal{H}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_\uparrow \\ F_\downarrow \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} F_\uparrow \\ F_\downarrow \end{bmatrix}. \quad (4.8)$$

Agrupando os termos e resolvendo o sistema, obtemos as seguintes soluções para os autovetores *up* e *down*:

$$\mathbf{F}_\uparrow(k_z, k_\parallel, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{(\mathcal{H}_{22} - E)^2 + (\mathcal{H}_{21})^2}} \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{22} - E \\ -\mathcal{H}_{21} \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

para *spin-up* e,

$$\mathbf{F}_\downarrow(k_z, k_\parallel, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{(\mathcal{H}_{11} + E)^2 + (\mathcal{H}_{12})^2}} \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{12} \\ -(\mathcal{H}_{11} - E) \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

para *spin-down*. As soluções da Eq.(4.7) nos fornece a relação de dispersão para os estados *up* e *down*:

$$E_\pm(k_\parallel, k_z, \varphi) = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_\parallel^2, k_z^2) \pm \sqrt{\gamma(k_\parallel, k_z) + \delta(k_\parallel)}, \quad (4.11)$$

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

$$\gamma(k_{\parallel}, k_z) = \alpha_D^2 k_{\parallel}^4 k_z^2 \cos(4\varphi) + \alpha_D^2 k_{\parallel}^2 k_z^4 - 2\alpha_D \beta k_{\parallel}^2 k_z^2 \sin(2\varphi), \quad (4.12)$$

$$\delta(k_{\parallel}) = \beta^2 k_{\parallel}^2 + \frac{1}{4} \alpha_D^2 k_{\parallel}^6 \sin^2(2\varphi) + \alpha_D \beta k_{\parallel}^4 \sin(2\varphi), \quad (4.13)$$

com polarizações circular σ^+ e σ^- quando φ é girado no sentido anti-horário e horário respectivamente. Da Eq.(4.11) o *gap* medindo o *spin splitting* entre os estados do *bulk* vale

$$E_G^{\sigma}(k_{\parallel}, \varphi, k_z) = E_+ - E_- = 2\sqrt{\gamma(k_{\parallel}, k_z) + \delta(k_{\parallel})}. \quad (4.14)$$

Para $k_z = 0$, podemos encontrar o ângulo crítico onde o *gap spin splitting* $E_G^{\sigma}(k_{\parallel}, \varphi, k_z)$ é nulo,

$$\varphi_c^{\sigma} = \frac{1}{2} \arcsen \left[-\frac{2\beta}{\alpha_D k_{\parallel}^2} \right]. \quad (4.15)$$

Este resultado depende da intensidade do campo elétrico \mathcal{E}_0 , e da razão entre as constantes da interação spin órbita e, define o máximo valor de k_{\parallel} , dado por $k_{\parallel}^c = \sqrt{2\beta/\alpha_D}$ que permite indicar dois regimes de simetria no qual o mecanismo de interação spin órbita é mais dominante: (a) SIA ou *Rashba* dominante para $k_{\parallel} < k_{\parallel}^c$, (b) BIA ou *Dresselhaus* dominante para $k_{\parallel} > k_{\parallel}^c$. Essas propriedades são válidas para algum semicondutor *zincblend* e nós iremos fixar no *InAs* que é o material da região do poço da dupla barreira de *InAs/GaSb* estudada nessa tese. É conveniente escolher como novo zero para o ângulo orbital, a direção $(1, -1)$ no plano xy , correspondendo a rotação $\varphi \implies \varphi - 45^{\circ}$.

Na Fig.(4.1), mostramos a relação de dispersão em função de k_z para $k_{\parallel} = 2,98 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e diferentes valores de φ quando o campo uniforme $\mathcal{E}_0 = 5 \text{ kV/cm}$ é aplicado. Na figura (a), onde $\varphi = 90^{\circ}$ mostramos a não parabolicidade *spin-split* para as dispersões *up* (linha vermelha) e *down* (linha preta). Para uma energia fixa dentro do *gap*, os estados *spin up* têm somente valores de k_z imaginários (não propagantes); o mesmo acontecendo na figura (c) onde indicamos o intervalo de energia $E_{c3} < E < E_{c4}$ onde as soluções de k_z são imaginárias. Na figura (b) mostramos a situação para $\varphi_c^{\sigma} = 39,87^{\circ}$ onde

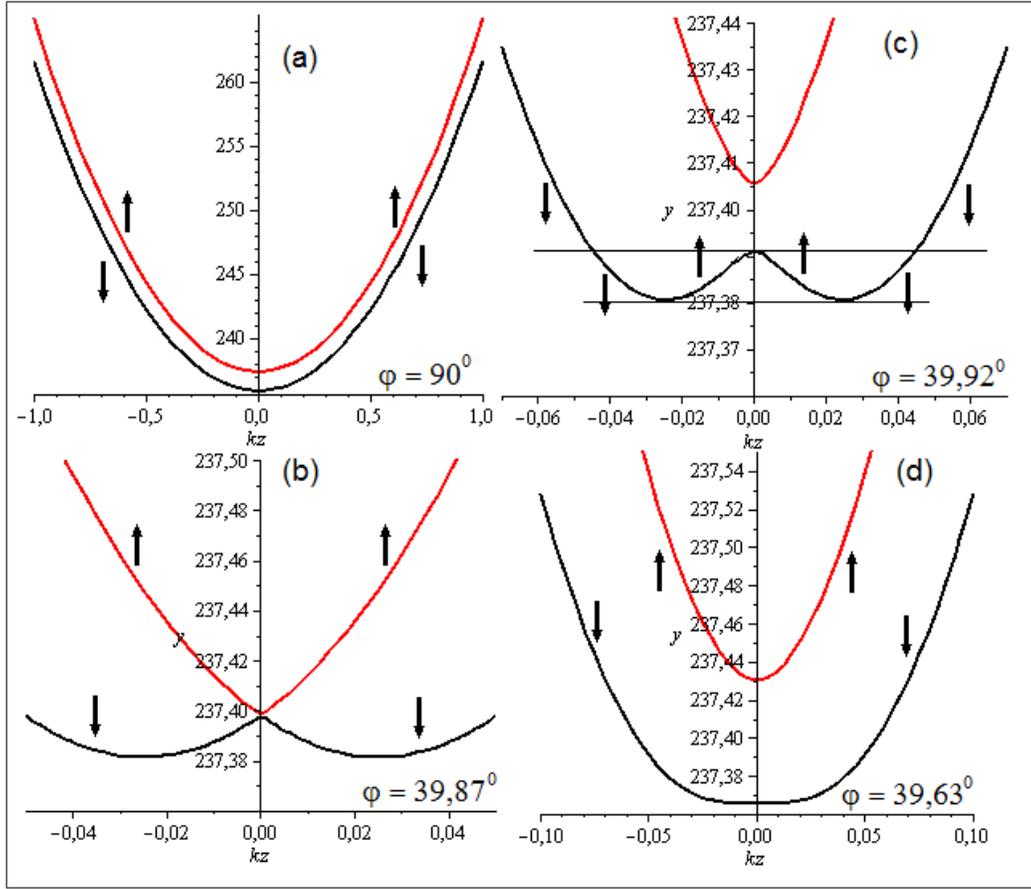


Figura 4.1: Anisotropia angular e dispersões no *bulk* para a polarização σ^+ para $k_{\parallel} = 2,98 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ e $\mathcal{E}_0 = 5 \text{kV/cm}$.

$E_G^{\sigma}(k_{\parallel}, \varphi, k_z) = 0$, justamente abaixo desse ângulo, para $\varphi = 39,63^{\circ}$ na parte (d) da figura, o *gap* se abre novamente, e os estados *up* têm duas soluções reais para k_z na região $E_{c2} < E < E_{c3}$, uma solução $-k_z$ que nos dá uma onda propagante na direção $+z$ (positiva) onde a velocidade de grupo é positiva, e $+k_z$ propagante na direção $-z$ com velocidade de grupo negativa.

Na Fig.(4.2) mostramos as dispersões em função de φ para a situação onde $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ na parte (a) e $k_{\parallel}^c = 0,918 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ na parte (b). As linhas pretas e vermelhas representam as dispersões *up* e *down* do combinado efeito BIA + SIA e a linha verde mostra somente o efeito do termo BIA atuando sozinho. Podemos observar da

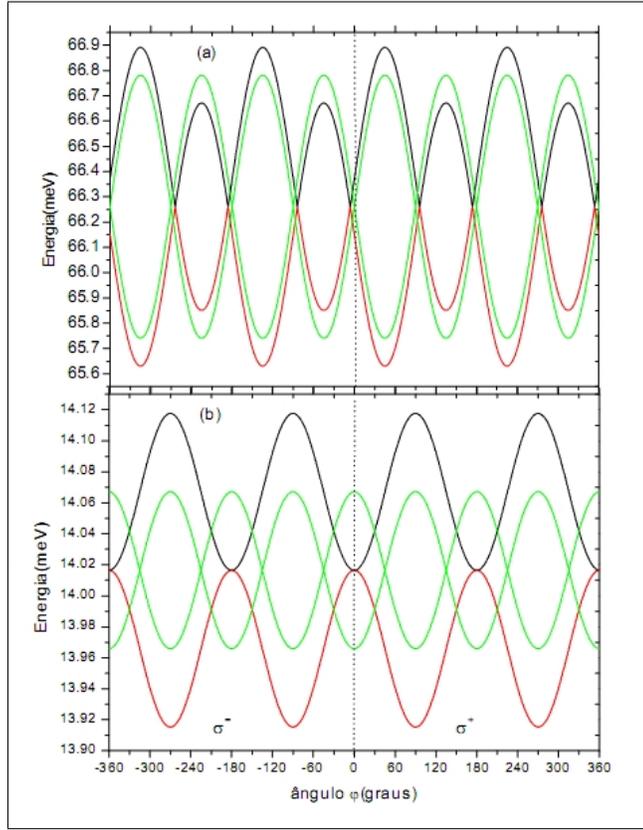


Figura 4.2: Dispersões *up* e *down* em função de φ para o regime BIA dominante com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ (a) e para o regime SIA com $k_{\parallel} = 0,9198 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ (b), para campo $\mathcal{E}_0 = 5 \text{kV/cm}$. As linhas pretas correspondem as dispersões *spin up*, as vermelhas *spin down* para o Hamiltoniano completo (BIA + SIA) e, as linhas verdes com somente termo de Rashba.

parte (b) que os termos combinado BIA + SIA atuam em fase e fora de fase em cada setor. Esta alternância de fase entre os termos do Hamiltoniano de interação spin órbita permite o regime Rashba para $k_{\parallel} \leq k_{\parallel}^c$ com simetria \mathcal{C}_{2V} , como mostrado na parte (a) da Fig.(4.3) onde mostramos o *spin splitting* no plano xy ; neste regime, o Hamiltoniano na Eq.(3.26) produz uma pequena mudança da simetria s para simetria p na estrutura eletrônica no centro da zona quando k_{\parallel} cresce, mas com valores de $k_{\parallel} \leq k_{\parallel}^c$ (regime SIA). Na parte (b) da Fig.(4.2) mostramos as dispersões no regime de Dresselhaus, para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$. Também nessa situação os termos do Hamiltoniano completo atuam

em fase e alta simetria *twofold* C_{2V} é mudada para *fourfold* C_{4V} . Como mostrado na parte (b) da Fig.(4.3) esta modificação induz pequena mudança na estrutura eletrônica no centro da zona, de estados com simetria *p* para simetria *d* quando k_{\parallel} cresce, mas com valores de $k_{\parallel} > k_{\parallel}^c$ (regime BIA); existe também o aparecimento de um, segundo *gap* secundário e um duplo vale no setor próximo ao ângulo crítico.

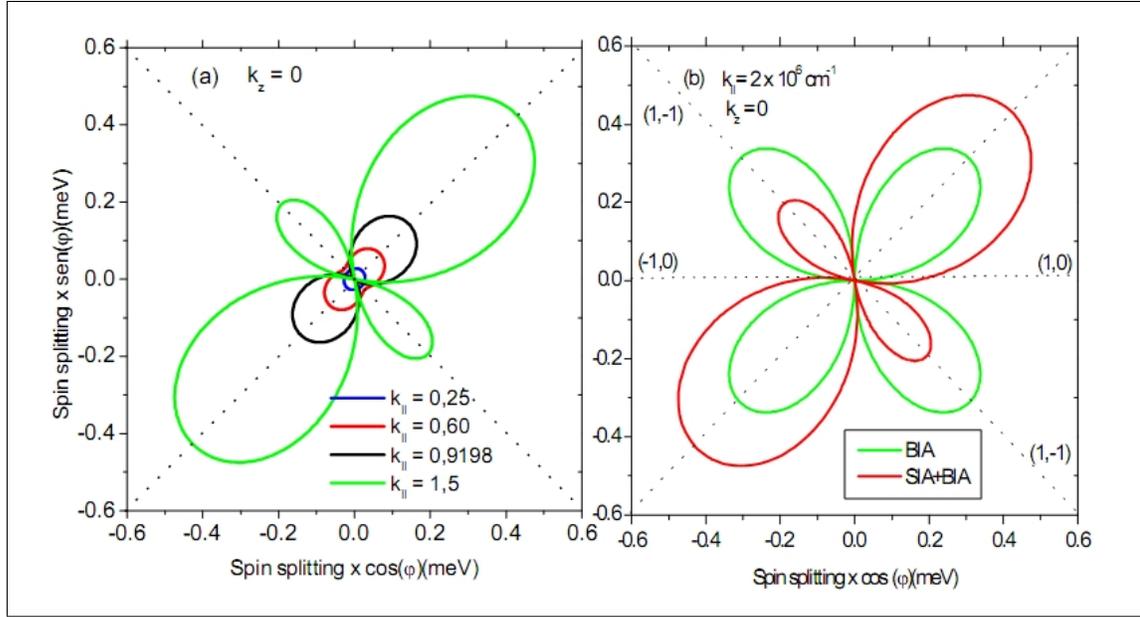


Figura 4.3: Dependência angular do *spin splitting* no *bulk* do InAs para $k_z = 0$ e campo $\mathcal{E}_0 = 5kV/cm$. Na parte (a) mostramos essa dependência para $k_{\parallel} \leq k_{\parallel}^c$ (regime SIA) e $k_{\parallel} \geq k_{\parallel}^c$ (regime BIA). Na parte (b) mostramos a comparação entre as interações de Rashba e Dresselhaus; a linha vermelha corresponde aos termos BIA + SIA e a linha verde ao termo BIA.

Na parte (b) da Fig.(4.3) comparamos os efeitos combinados BIA + SIA (linhas vermelhas) e somente BIA (linha verde) para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \geq k_{\parallel}^c$ no *spin splitting* para o centro da zona $k_z = 0$. Podemos ver claramente que os efeitos são adicionados ao longo das direções $(\pm 1, \pm 1)$ nas direções de máximo *spin splitting* e o termo BIA domina ao longo das direções $(\pm 1, \mp 1)$ onde o *gap* secundário aparece.

4.2 Natureza das Soluções de k_z

Para $k_{\parallel} \neq 0$, o procedimento de cálculo da matriz de espalhamento exige expressar k_z como $k_z = k_z(E, k_{\parallel}, \varphi)$. Para isso deve-se inverter a expressão das autoenergias, que nos dá

$$ak_z^4 - bk_z^2 + c = 0, \quad (4.16)$$

obviamente uma equação biquadrada, com quatro soluções. São elas

$$k_{z\sigma} = \pm \sqrt{\frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}}, \quad (4.17)$$

onde

$$a = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)^2 - \alpha_D^2 k_{\parallel}^2, \quad (4.18)$$

$$b = 2 \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)^2 k_{\parallel}^2 + 2\alpha_D \beta k_{\parallel}^2 \sin(2\varphi) - 2E \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right) - \alpha_D^2 k_{\parallel}^4 \cos^2(2\varphi) + \frac{\alpha_D^2 k_{\parallel}^4}{2} [1 - \cos(4\varphi)], \quad (4.19)$$

$$c = E^2 - 2E \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right) k_{\parallel}^2 + \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)^2 k_{\parallel}^4 - \delta(k_{\parallel}). \quad (4.20)$$

Ao contrário do modelo parabólico, os valores de $k_{z\uparrow}$ e $k_{z\downarrow}$ nem sempre são reais na região do poço e imaginários na região da barreira, mas dependem das magnitudes de k_x , k_y e E . De fato, fixando-se k_x, k_y , φ e E na Eq.(4.11) e impondo-se as condições necessárias para termos soluções reais ou complexas na Eq.(4.17), encontramos para quais intervalos de energia essas condições se verificam, dependendo do tipo de entrada se *spin-up* ou *spin-down* no emissor. Assim procedendo, as condições mencionadas acima, podem ser representadas por três superfícies de energias críticas no plano xy , das quais somente (E_{c3} e E_{c4}) podem ser obtidas analiticamente:

$$E_{c3}(k_{\parallel}, \varphi) = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} - \sqrt{\beta^2 k_{\parallel}^2 + \frac{1}{4} \alpha_D^2 k_{\parallel}^6 \sin^2(2\varphi) + \alpha_D \beta k_{\parallel}^4 \sin(2\varphi)}, \quad (4.21)$$

Região	Energia	$k_z \downarrow$	$k_z \uparrow$
<i>i</i>	$E - V > E_{c4}$	real (positivo)	real (positivo)
<i>ii</i>	$E_{c3} > E - V > E_{c4}$	real (positivo)	imaginário puro
<i>iii</i>	$E_{c2} < E - V > E_{c3}$	real (positivo)	real (negativo)

Tabela IV.1: Natureza das soluções de kz

$$E_{c4}(k_{\parallel}, \varphi) = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + \sqrt{\beta^2 k_{\parallel}^2 + \frac{1}{4} \alpha_D^2 k_{\parallel}^6 \sin^2(2\varphi) + \alpha_D \beta k_{\parallel}^4 \sin(2\varphi)}, \quad (4.22)$$

dividindo todo o espectro de energia em três regiões (*i*), (*ii*) e (*iii*).

Para cada região de energia considerada, k_z tem seguintes soluções mostradas na tabela IV.1. e mostradas na figura abaixo

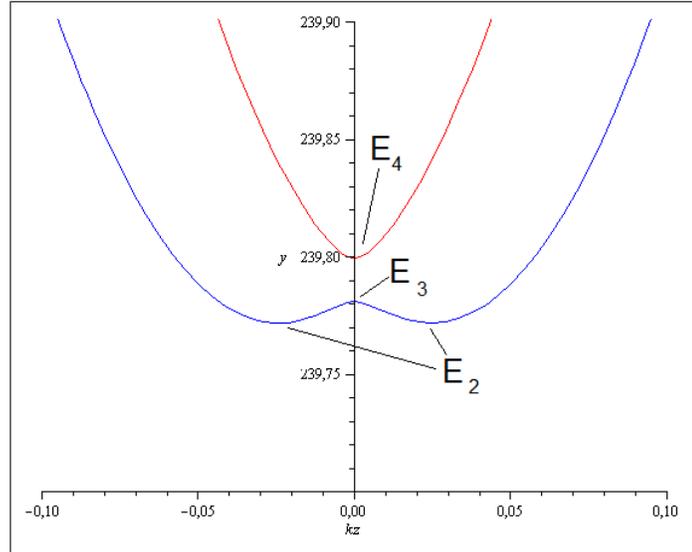


Figura 4.4: Gráfico genérico das relações de dispersão *up* e *down*, mostrando claramente as energias críticas E_1 , E_2 , E_3 e E_4 .

Tais informações são necessárias para determinar-se os limites de integração no cálculo da corrente. No cálculo das transmissividades a região (*iii*) é suprimida uma vez que o passo em energia é maior que o intervalo de energia dessa região.

Na Fig.(4.5) mostramos a dependência angular do momento k_z para momento paralelo $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, campo $\mathcal{E}_0 = 5 \text{ kV/cm}$ e energia $E_k = 200 \text{ meV}$. Podemos verificar

facilmente que tanto para a polarização σ^+ ($0^\circ \Rightarrow 360^\circ$) e σ^- ($0^\circ \Rightarrow -360^\circ$) existe uma periodicidade de 180° .

4.3 Formalismo da Matriz de Espalhamento

O segundo passo para a obtenção da matriz de espalhamento é a construção da função de onda total em cada região da heteroestrutura. A partir das soluções da equação de massa efetiva no cristal perfeito, a função de onda tal em cada camada l da heteroestrutura (ver Fig.4.5) é obtida, tomando-se combinações lineares dessas soluções com o mesmo valor de energia, E , φ e do momento lateral paralelo às camadas, $k_{\parallel} = (k_x, k_y)$.

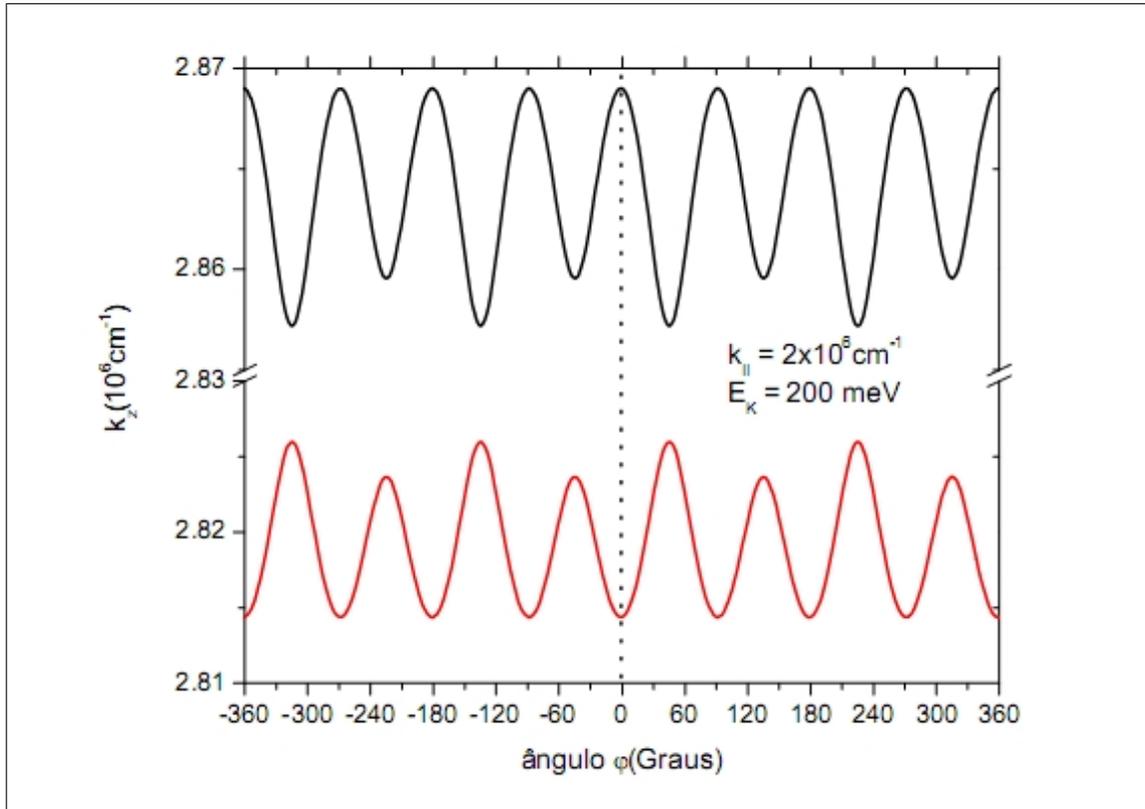


Figura 4.5: Dependência angular do vetor de onda k_z *up* (linha preta) e *down* (linha vermelha) para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$, campo $\mathcal{E}_0 = 5 \text{kV/cm}$ e energia $E_k = 200 \text{meV}$.

Como o potencial $V(z)$ quebra a simetria de translação na direção z , a função de onda em cada camada pode ser escrita como:

$$\mathbf{F}(z) = \sum_{\sigma(\uparrow,\downarrow)} [a_{l,\sigma} \mathbf{F}_\sigma(+k_{z\sigma}) e^{+ik_{z\sigma}(z-z_l)} + b_{l,\sigma} \mathbf{F}_\sigma(-k_{z\sigma}) e^{-ik_{z\sigma}(z-z_l)}], \quad (4.23)$$

aqui, omitimos a onda plana $\exp(ik_{\parallel}\rho)$, pois k_{\parallel} se conserva no processo de tunelamento. Em particular para sistema com 5 regiões (dupla barreira) para a região do emissor (representado por $l = 0$) podemos escrever a função de onda total como:

$$\mathbf{F}^0(z) = \sum_{\sigma(\uparrow,\downarrow)} [a_{0,\sigma} \mathbf{F}_\sigma(+k_{z\sigma}) e^{+ik_{z\sigma}(z-z_1)} + r_{0,\sigma} \mathbf{F}_\sigma(-k_{z\sigma}) e^{-ik_{z\sigma}(z-z_1)}], \quad (4.24)$$

e para região do coletor

$$\mathbf{F}^4(z) = \sum_{\sigma(\uparrow,\downarrow)} t_{4,\sigma} \mathbf{F}_\sigma(+k_{z\sigma}) e^{+ik_{z\sigma}(z-z_4)} + b_{4,\sigma} \mathbf{F}_\sigma(-k_{z\sigma}) e^{-ik_{z\sigma}(z-z_4)}. \quad (4.25)$$

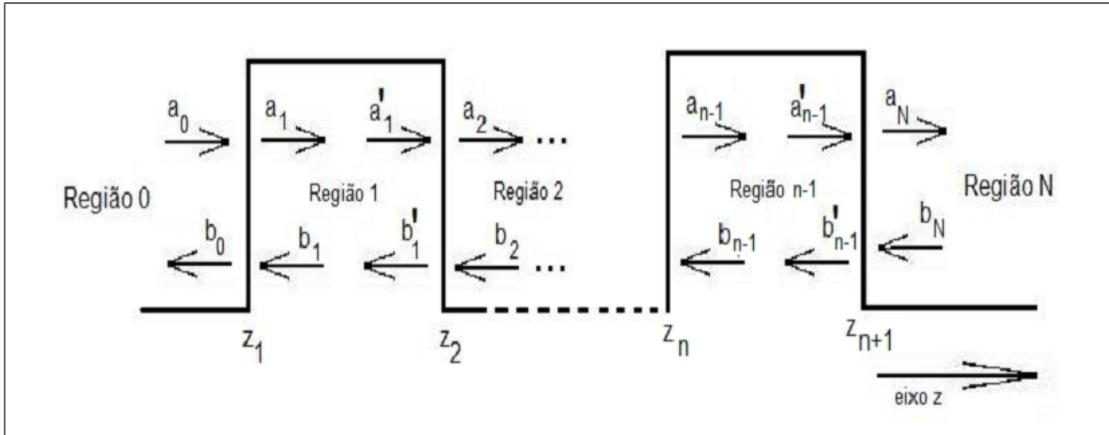


Figura 4.6: Representação esquemática de uma heteroestrutura, crescida ao longo do eixo z , mostrando as diversas regiões, bem como os coeficientes das ondas das diversas regiões.

Assim aplicando as condições de contorno na interface n ou seja, a conservação da

densidade de probabilidade e da densidade de corrente

$$\begin{aligned} F(z_j) |_{z_j} &= \text{contínuo} \\ \underline{J}_z F(z_j) |_{z_j} &= \text{contínuo,} \end{aligned} \quad (4.26)$$

encontramos a seguinte equação matricial

$$\begin{pmatrix} (\mathbf{M}_n)_{11} & (\mathbf{M}_n)_{12} \\ (\mathbf{M}_n)_{21} & (\mathbf{M}_n)_{22} \end{pmatrix}_{4 \times 4} \times \begin{pmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\mathbf{M}_{n+1})_{11} & (\mathbf{M}_{n+1})_{12} \\ (\mathbf{M}_{n+1})_{21} & (\mathbf{M}_{n+1})_{22} \end{pmatrix}_{4 \times 4} \times \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{n+1} \\ \mathbf{b}_{n+1} \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

onde a matriz M de dimensão 2×2 dão os elementos que formam a matriz de transferência usual [20].

$$M = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\uparrow}^+ & \mathbf{F}_{\downarrow}^+ & \mathbf{F}_{\uparrow}^- & \mathbf{F}_{\downarrow}^- \\ \underline{J}_{z\uparrow}^+ \mathbf{F}_{\uparrow}^+ & \underline{J}_{z\downarrow}^+ \mathbf{F}_{\downarrow}^+ & \underline{J}_{z\uparrow}^- \mathbf{F}_{\uparrow}^- & \underline{J}_{z\downarrow}^- \mathbf{F}_{\downarrow}^- \end{bmatrix}, \quad (4.28)$$

onde usamos uma notação comprimida para os elementos na forma $\mathbf{F}_{\uparrow\downarrow}^{\pm} \equiv \mathbf{F}_{\uparrow\downarrow}(\pm k_{z\uparrow\downarrow})$ para as funções envelopes e $\underline{J}_{z\uparrow\downarrow}^{\pm} \equiv \underline{J}_{z\uparrow\downarrow}(\pm k_{z\uparrow\downarrow})$ para o vetor densidade de corrente. Também, \mathbf{a}_n é o vetor que representa a amplitude da onda incidente para os estados de *spin up* e *down* e \mathbf{b}_n a amplitude da onda refletida. A partir da Eq.(4.27) e com alguma longa manipulação algébrica, podemos relacionar os coeficientes das ondas espalhadas numa interface (\mathbf{a}_{n+1} e \mathbf{b}_n) com os das ondas incidentes (\mathbf{a}_n e \mathbf{b}_{n+1}), na forma

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{n+1} \\ \mathbf{b}_n \end{pmatrix} = \mathbf{S}_{n+1} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_n \\ \mathbf{b}_{n+1} \end{pmatrix}, \quad (4.29)$$

sendo

$$\mathbf{S}_{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n+111} & -\mathbf{M}_{n12} \\ \mathbf{M}_{n+121} & -\mathbf{M}_{n22} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{n11} & -\mathbf{M}_{n+112} \\ \mathbf{M}_{n21} & -\mathbf{M}_{n+122} \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

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

Aplicando as condições de contorno nas interfaces localizadas nas posições $z = z_1$ e

$z = z_2$, obtemos :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_1 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}'_1 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}. \quad (4.32)$$

Na região 1 (Fig.4.6), os coeficientes $(\mathbf{a}'_1, \mathbf{b}_1)$ das ondas que saem e os coeficientes das ondas que entram nesta região $(\mathbf{a}_1, \mathbf{b}'_1)$ estão relacionados da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_1 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}'_1 \end{pmatrix}, \quad (4.33)$$

sendo

$$\mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} e^{ik_z \uparrow d} & & & \\ & e^{ik_z \downarrow d} & & \\ & & e^{-ik_z \uparrow d} & \\ & & & e^{-ik_z \downarrow d} \end{pmatrix}, \quad (4.34)$$

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

Das Eqs.(4.32) e (4.33), obtém-se a relação

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}, \quad (4.35)$$

onde o símbolo \otimes é usado para denotar a composição em série de duas matrizes, cuja regra do produto é dada na Ref. [41]. Da mesma forma usando as Eqs.(4.31) e (4.35)

podemos combinar \mathbf{S}_1 e $\mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2$, obtendo-se assim:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

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

$$\begin{pmatrix} \mathbf{t}_4 \\ \mathbf{r}_0 \end{pmatrix} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \otimes \mathbf{P}_2 \otimes \mathbf{S}_3 \otimes \mathbf{P}_3 \otimes \mathbf{S}_4 \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_4 \end{pmatrix}, \quad (4.37)$$

onde

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 \otimes \mathbf{P}_1 \otimes \mathbf{S}_2 \otimes \mathbf{P}_2 \otimes \mathbf{S}_3 \otimes \mathbf{P}_3 \otimes \mathbf{S}_4, \quad (4.38)$$

é a matriz de espalhamento total.

4.4 Transmissividade Dependente do Spin

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

Seguindo a discussão na Ref. [34] os coeficientes de transmissão são calculados,

usando-se a definição para a corrente de probabilidade para a direção z

$$j_{z\sigma} = \text{Re} \left(\mathbf{F}_\sigma^\dagger \underline{J}_{z\sigma} \mathbf{F}_\sigma \right). \quad (4.39)$$

A densidade de corrente de probabilidade no emissor vale:

$$j_z^e = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (j_{z\sigma}^+ + j_{z\sigma}^-)_0, \quad (4.40)$$

onde $j_{z\sigma}^+$ é a densidade de corrente de probabilidade incidente e $j_{z\sigma}^-$ é a densidade de corrente de probabilidade refletida (ou espalhada), seguindo a notação $\mathbf{F}(\pm k_{z\sigma})$, etc., introduzida anteriormente. De acordo com a Eq.(4.39), as expressões para essas correntes são:

$$[j_{z\sigma}^+]_0 = |a_{0\sigma}|^2 \text{Re}[\mathbf{F}_\sigma^\dagger(+k_{z\sigma}) \underline{J}_{z\sigma} (+k_{z\sigma}) \mathbf{F}_\sigma(+k_{z\sigma})] \quad (4.41)$$

e

$$[j_{z\sigma}^+]_0 = |r_{0\sigma}|^2 \text{Re}[\mathbf{F}_\sigma^\dagger(+k_{z\sigma}) \underline{J}_{z\sigma} (+k_{z\sigma}) \mathbf{F}_\sigma(+k_{z\sigma})], \quad (4.42)$$

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

$$[j_{z\sigma}^+]_4 = |t_4^\sigma|^2 \text{Re}[\mathbf{F}_\sigma^\dagger(+k_{z\sigma}) \underline{J}_{z\sigma} (+k_{z\sigma}) \mathbf{F}_\sigma(+k_{z\sigma})]. \quad (4.43)$$

Levando-se em conta o caráter estacionário do sistema, a transmissividade é definida como a razão entre o fluxo de corrente de probabilidade transmitida (região 4) $[j_{z\sigma}^+]_4$ e a incidente $[j_{z\sigma}^+]_0$

$$T_{\sigma \rightarrow \sigma'}(E, k_{||}, \varphi) = \Re e \left[(t_{\sigma'}^\sigma)^* (t_{\sigma'}^\sigma) \frac{\langle \mathbf{F}_{\sigma'}^+ | \underline{J}_{z\sigma'}^+ | \mathbf{F}_{\sigma'}^+ \rangle_{z=z_4}}{\langle \mathbf{F}_\sigma^+ | \underline{J}_{z\sigma}^+ | \mathbf{F}_\sigma^+ \rangle_{z=z_0}} \right], \quad (4.44)$$

onde os coeficientes $t_{\sigma'}^\sigma = t_{4\sigma'}/a_{0\sigma}$ são obtidos através da matriz de espalhamento,

Eq.(4.38).

A partir do cálculo da transmissividade podemos calcular a eficiência de polarização de spin P , através da diferença da transmissividade dos estados de spins \uparrow (up) e \downarrow ($down$) para todos os dois canais de entrada \uparrow (up) e \downarrow ($down$)

$$P = \frac{(T_{\uparrow \rightarrow \uparrow} + T_{\downarrow \rightarrow \uparrow}) - (T_{\uparrow \rightarrow \downarrow} + T_{\downarrow \rightarrow \downarrow})}{(T_{\uparrow \rightarrow \uparrow} + T_{\downarrow \rightarrow \uparrow}) + (T_{\uparrow \rightarrow \downarrow} + T_{\downarrow \rightarrow \downarrow})}. \quad (4.45)$$

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

Capítulo 5

Resultados da Transmissividade

Neste momento, antes de discutirmos os resultados para a transmissividade é conveniente fazermos uma pequena recapitulação da metodologia utilizada para o cálculo dessas quantidades, que é baseado na técnica da matriz de espalhamento dentro da aproximação de massa efetiva.

Nesse trabalho, utilizamos a técnica da matriz de espalhamento, na aproximação de massa efetiva. Basicamente esta técnica consiste em relacionar via equação matricial coeficientes das ondas que incidem nas interfaces de uma heteroestrutura [veja a Fig.(4.6)] com os coeficientes das ondas que são espalhadas (refletidas). Por sua vez, as ondas são obtidas através de combinações lineares das funções envelopes, derivadas das soluções da equação de massa efetiva para o *bulk* do material de cada camada da heteroestrutura, com k_z , o vetor de onda na direção de crescimento, obtido da expressão da relação de dispersão para energia, fixando-se os valores de E e do vetor de onda paralelo às camadas, $k_{||}$; parâmetros estes que se conservam no processo de tunelamento. Todo o processo de cálculo pode ser resumido como segue: i) inicialmente, resolve-se analiticamente a equação de massa efetiva no cristal perfeito para um determinado valor de energia obtendo-se então os autovalores e autovetores (funções envelopes) para cada tipo de partícula. A partir da expressão da energia, deriva-se as quatro soluções para o vetor de onda na direção $-z$, satisfazendo às condições $k_z = f(E, k_{||}, \varphi)$, sendo duas das soluções para *spin-up*

($\pm k_{z\uparrow}$) e duas *spin-down* ($\pm k_{z\downarrow}$). As duas funções envelopes, obtidas das soluções da equação de massa efetiva, são $\mathbf{F}_\uparrow(k_{\parallel}, k_{z\uparrow}, \varphi)$, $\mathbf{F}_\downarrow(k_{\parallel}, k_{z\downarrow}, \varphi)$, para os *spin-up* e *spin-down*, correspondentes aos estados de base $|1/2, 1/2\rangle$, $|1/2, -1/2\rangle$, respectivamente; (ii) em seguida, constrói-se a função de onda total em cada região n da heteroestrutura como combinação linear de quatro ondas planas, correspondentes às duas soluções $\mathbf{F}(k_{\parallel}, k_{z\sigma}, \varphi)$, substituindo-se $k_{z\sigma} = \pm k_{z\uparrow}, \pm k_{z\downarrow}$ para um dado valor de E e fixando-se $k_{\parallel} = (k_x, k_y)$; (iii) finalmente, usam-se as duas condições de contorno em cada interface, isto é, uma que nos garante a condição de continuidade da função de onda total e a outra, a conservação da densidade de probabilidade de corrente, obtendo-se daí uma equação matricial, que relaciona os coeficientes das ondas incidentes com os coeficientes das ondas refletida através da matriz de espalhamento. Resolvendo-se essa equação matricial obtém-se os coeficientes de transmissão $t_{\sigma'}^{\sigma}$.

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

Os resultados que serão discutidos mais adiante, referem-se às heteroestruturas de dupla barreiras assimétricas de *InAs/GaSb*, cujos parâmetros de massa efetiva, Dresselhaus e Rashba estão listados na Tab.(V.1). Em todos os casos o potencial da barreira vale $V_b = 320 \text{ meV}$ e as dimensões da dupla barreira L_{b1} , L_p e L_{b2} representam as larguras da barreira da esquerda, do poço e da barreira da direita, respectivamente; todas as medidas são dadas em angstroms (\AA).

Na Tabela V.1 temos os coeficientes de Dresselhaus e Rashba para os compostos escolhidos.

Chamamos a atenção a uma aproximação feita neste trabalho; consiste basicamente

	<i>GaSb</i>	<i>InAs</i>	<i>InSb</i>
$\gamma(\text{meV}/\text{\AA}^2)$	0.187	0.13	0.16
$\alpha(\text{\AA}^2)$	0.0033	0.011	0.05
m^*/m	0.041	0.023	

Tabela V.1: Coeficientes de Dresselhaus e Rashba e Massa efetiva, para os compostos utilizados no trabalho

em desprezar o termo de Rashba nas regiões de entrada e saída (emissor e coletor) da heteroestrutura. A mesma aproximação foi feita por Perel [13] em seu trabalho que mostra que o termo de Dresselhaus é suficiente para induzir uma dependência com o spin na transmissividade. Em nosso caso, buscávamos uma maior simplificação nos cálculos.

5.1 Transmissividade de Spins Polarizados em Dupla Barreira

De uma forma simplificada, podemos dizer que a banda de condução de um semicondutor com a inclusão da interação spin órbita é constituída por dois tipos de portadores (elétrons *spin up* e *spin down*). O confinamento dos elétrons na região do poço da dupla barreira dá origem às sub-bandas de condução $E_{\uparrow n}(k_{\parallel}, \varphi)$ e $E_{\downarrow n}(k_{\parallel}, \varphi)$ que podem ser obtidas a partir da equação de massa efetiva, onde n é o índice que classifica os níveis de energia dentro do poço quântico. Para valores de $k_{\parallel} \neq 0$ essas sub-bandas podem interagir modificando as massas efetivas dessas partículas, quando comparadas com àquelas observadas no *bulk* (cristal perfeito), sendo um forte indicativo de que a transmissividade deve mudar sensivelmente com o parâmetro k_{\parallel} . Essa interação é formalmente descrita em termos dos elementos proporcionais a k_{\parallel} fora da diagonal do Hamiltoniano de Dresselhaus e Rashba. Nesta seção, vamos analisar o *spin splitting* e o efeito do *spin mixing* (mistura) no processo de tunelamento de spins polarizados em dupla barreiras de *InAs/GaSb* (100, 100, 100).

Inicialmente na Fig.(5.1) mostramos o efeito da interação spin órbita de Dresselhaus

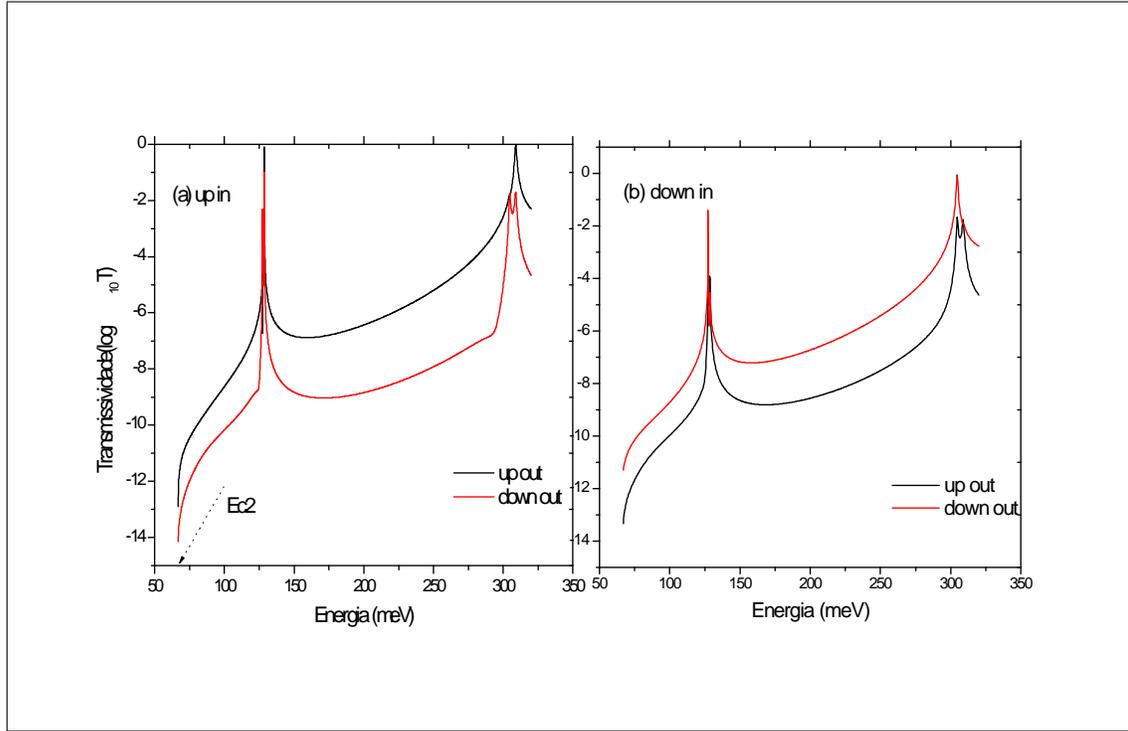


Figura 5.1: Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100,100,100) de InAs/GaSb com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $\varphi = 30^\circ$ para campo elétrico nulo. A parte (a) para partícula *up* incidente e a parte (b) para partícula *down* incidente.

na transmissividade de elétrons em dupla barreiras de *InAs/GaSb* (100, 100, 100) com $k = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $\varphi = 30^\circ$ e campo elétrico nulo (sem efeito Rashba) em função da energia incidente, começando da energia crítica E_{c4} ; a parte (a) para *spin up* incidente (*up in*) e a parte (b) para *spin down* incidente (*down in*). Para incidência *spin up* a curva de transmissão, $T_{up \text{ out}}$ (linha preta) está acima da curva de transmissão $T_{down \text{ out}}$ (linha vermelha) e, os picos ressonantes $E_{\uparrow 1}$ e $E_{\uparrow 2}$ emergem com uma intensidade maior para saída *up out*. Por outro lado para incidência *down* a curva de transmissão, $T_{down \text{ out}}$ (linha vermelha) está acima da curva de transmissão $T_{up \text{ out}}$ (linha preta) e, os picos ressonante $E_{\downarrow 1}$ e $E_{\downarrow 2}$ emergem com uma intensidade maior para saída *down out*. Devido ao acoplamento entre bandas *up* e *down* vindas dos termos proporcionais a k_{\parallel} fora da

diagonal do Hamiltoniano de Dresselhaus, para cada incidência (*up* ou *down*) temos dois canais de tunelamento *up out* e *down out* e, os picos nas curvas de transmissão correspondem aos estados ressonantes $E_{\downarrow n}(\textit{down})$ e $E_{\uparrow n}(\textit{up})$ que degenerados em $k_{\parallel} = 0$, se separam quando incluímos a interação spin órbita. O primeiro estado $E_{\downarrow 1}$ nessas curvas é classificado como *spin up* e o segundo $E_{\downarrow 1}$ *spin down*, o mesmo ordenamento acontecendo para o nível $n = 2$. Para $n = 1$ primeiro estado $E_{\downarrow 1}$ é classificado como *spin down* porque, para a incidência *down in* ele aparece como o estado básico com um pico com intensidade maior para o canal de saída *down out*; analogamente, o segundo estado $E_{\uparrow 1}$ é classificado como *spin up* porque para incidência *spin up* ele aparece como o segundo pico de maior intensidade para saída *spin up*. Dessa figura podemos notar que os *spin splitting* para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ vale $\Delta E = E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1} = 1,3 \text{ meV}$ para $n = 1$ e $\Delta E = E_{\uparrow 2} - E_{\downarrow 2} = 4,1 \text{ meV}$ para $n = 2$.

Na Fig.(5.2) mostramos o efeito do momento paralelo nas curvas de transmissividade para elétron incidente *down* para três valores do momento paralelo as camadas, $k_{\parallel} = 0, 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $1,2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $\varphi = 30^0$ e campo elétrico nulo. Para $k_{\parallel} = 0$ (linhas tracejadas) não existe interação spin órbita e temos apenas um canal de saída *down out*. Podemos observar que à medida que k_{\parallel} paralelo aumenta, os picos ressonantes se deslocam para a direita, uma vez que, os estados ressonantes dentro do poço que são dependentes de k paralelo crescem com o aumento da energia e, ocorre um aumento do *spin splitting*. Assim para o momento $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ [linha azul (*down out*) e linha verde (*up out*)] o *spin splitting* para o nível $n = 1$ vale $\Delta E = E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1} = 0,85 \text{ meV}$ e para o nível $n = 2$, $\Delta E = E_{\uparrow 2} - E_{\downarrow 2} = 2,42 \text{ meV}$ e para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $\Delta E = E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1} = 1,3 \text{ meV}$ para $n = 1$ e $\Delta E = E_{\uparrow 2} - E_{\downarrow 2} = 4,1 \text{ meV}$ para o nível $n = 2$. Para finalizar, podemos observar dessa figura que à medida que o parâmetro k_{\parallel} aumenta as curvas de transmissividade *spin out* e *down out* ficam bem mais próximas realçando o *mixing* entre os estados *up* e *down*.

Na Fig.(5.3), mostramos o efeito da interação spin órbita de Rashba na transmissividade de elétrons em dupla barreiras de *InAs/GaSb* (100,100,100) com $k_{\parallel} = 2 \times$

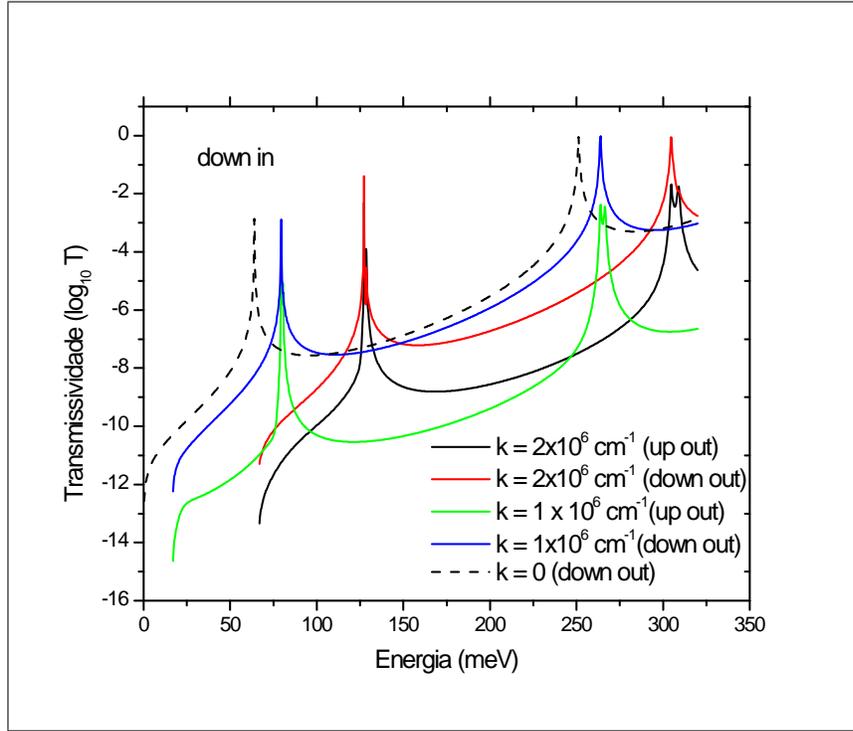


Figura 5.2: Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) de $InAs/GaSb$ com $k_{\parallel} = 0, 1 \times 10^6 cm^{-1}$, $1 \times 10^6 cm^{-1}$, $\varphi = 30^\circ$ para campo elétrico nulo para partícula *down* incidente.

$10^6 cm^{-1}$, $\varphi = 30^\circ$ e campo elétrico $E = 100 kV/cm$ com termos de Dresselhaus nulos. Neste caso é nulo o efeito da interação spin órbita no emissor e coletor e os estados de *bulk up* e *down* são degenerados, o que implica curvas de transmissividades idênticas para entrada *spin up* e *down*, mudando apenas o tipo de portador na saída ($T_{\sigma \rightarrow \sigma'} = T_{\sigma' \rightarrow \sigma}$). Para esse valor de campo elétrico e momento paralelo encontramos um *spin splitting* de $1,4 meV$ para o primeiro nível ressonante, e $1,1 meV$ para o segundo nível, bem menor que o valor encontrado $4,1 meV$ para esse segundo nível quando incluímos apenas termos de interação spin órbita de Dresselhaus; nessa situação, o campo elétrico faz com que o segundo nível fique menos localizado na região do poço sofrendo menos influência da interação spin órbita. O *spin splitting* depende, além do momento paralelo às camadas, da intensidade do campo elétrico externo.

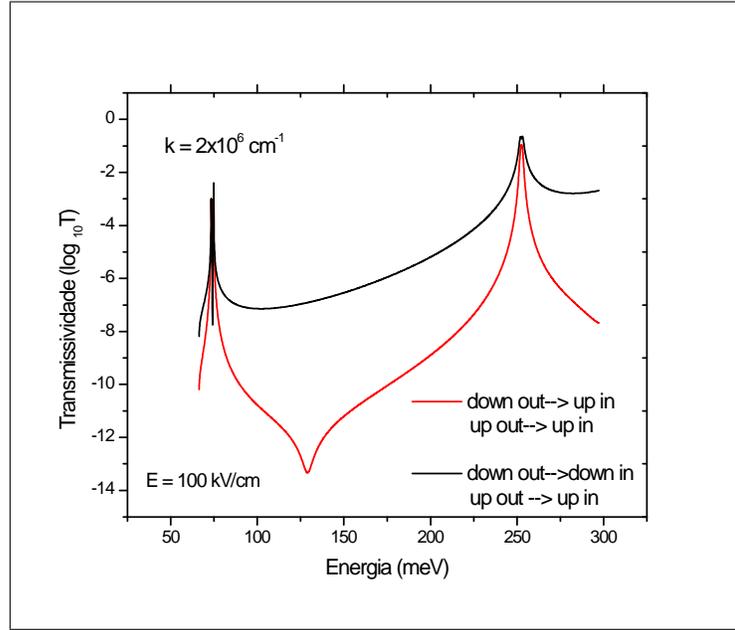


Figura 5.3: Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100,100,100) de *InAs/GaSb* para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $\varphi = 30^0$ e campo elétrico $E = 100 \text{ kV/cm}$, com partículas *up* e *down* incidentes.

Isso é ilustrado na Fig.(5.4), onde mostramos o efeito Rashba no *spin splitting* do primeiro nível ressonante do poço quântico, através do cálculo da transmissividade de elétrons *up out* para incidência *up* para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $\varphi = 30^0$ e campos elétricos de 40 kV/cm , 80 kV/cm e 100 kV/cm correspondendo respectivamente a *spin splitting* de $0,64 \text{ meV}$, $1,14 \text{ meV}$ e $1,4 \text{ meV}$.

Na Fig.(5.5), mostramos o efeito combinado BIA (Dresselhaus) + SIA (Rashba) na transmissividade de elétrons em dupla barreira de *InAs/GaSb* (100,100,100) Å para $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $\varphi = 30^0$ e campo elétrico $E = 100 \text{ kV/cm}$ a parte (a) para *spin up* incidente (*up in*) e a parte (b) para *spin down* incidente (*down in*). Podemos observar, que à medida que o momento paralelo aumenta ocorre um aumento do *spin splitting*; assim para o momento $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ o *spin splitting* para o nível $n = 1$ vale $\Delta E = E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1} = 0,61 \text{ meV}$ e para o nível $n = 2$, $\Delta E = E_{\uparrow 2} - E_{\downarrow 2} = 1,92 \text{ meV}$ e para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $\Delta E = E_{\uparrow 1} - E_{\downarrow 1} = 1,13 \text{ meV}$ para o primeiro nível

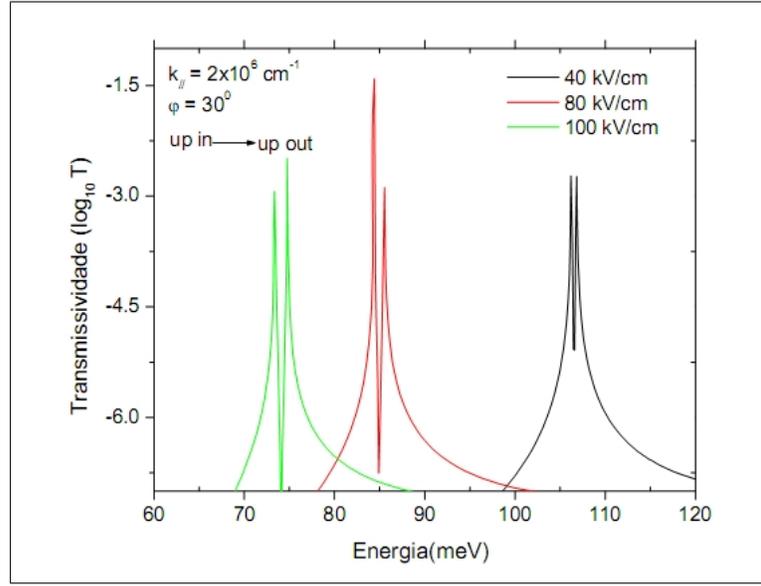


Figura 5.4: Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100,100,100) de $InAs/GaSb$ para $2 \times 10^6 cm^{-1}$, $\varphi = 30^0$ e campos elétricos $E = 40, 80$ e $100 kV/cm$ para elétron up .

$n = 1$ e $\Delta E = E_{\uparrow 2} - E_{\downarrow 2} = 3,11$ meV para o nível $n = 2$; entretanto essas separações em energia são menores para situação vista anteriormente onde só temos contribuição de Dresselhaus. Isso vem do fato de que para o ângulo considerado, $\varphi = 30^0$ o *spin mixing* é maior para a situação onde temos somente interação spin órbita de Dresselhaus do que a situação onde temos a completa interação Dresselhaus + Rashba.

Isso pode ser comprovado na Fig.(5.6) onde mapeamos o termo de *mixing* do Hamiltoniano \mathcal{H}_{12} com interação Dresselhaus (linha vermelha) e Dresselhaus-Rashba (linha preta) em função do ângulo φ na região do poço para um valor de $k_z = 3 \times 10^6 cm^{-1}$. Como podemos observar dessa figura em $\varphi = 30^0$ o módulo de \mathcal{H}_{12} com somente interação de Dresselhaus é maior quando temos o efeito combinado Rashba e Dresselhaus; situações interessantes são para os ângulos $\varphi = 45^0$ onde *mixing* é mínimo e $\varphi = 135^0$ onde é máximo. Nessas situações nas regiões do emissor e coletor onde só temos efeito de Dresselhaus, linear e cúbico, os estados do *bulk spin up* e *down* são quase desacoplados e,

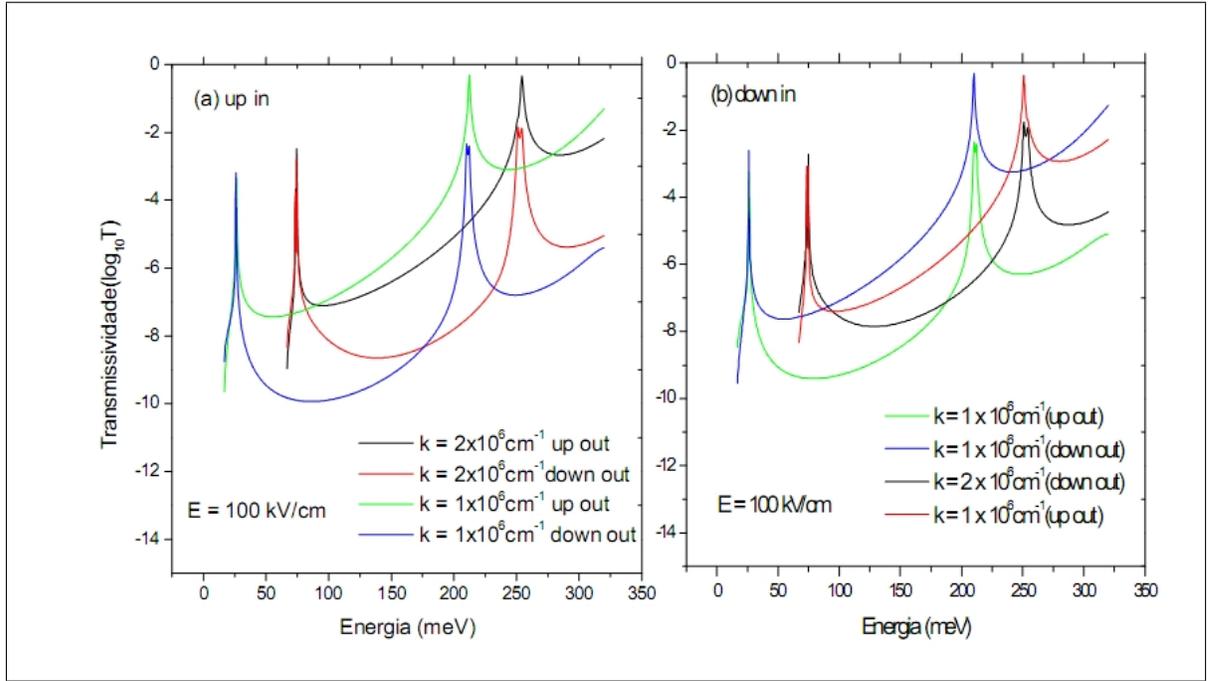


Figura 5.5: Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) de $InAs/GaSb$ com $k_{\parallel} = 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $\varphi = 30^{\circ}$ para campo elétrico 100 kV/cm . Parte (a) para partícula up incidente e (b) partícula $down$ incidente.

temos dois canais de saída independentes, isto é, incidindo $spin-up$ na região do emissor temos apenas saída up na região do coletor e incidindo $spin-down$ na região do emissor temos apenas saída $spin down$ no coletor.

Na Fig.(5.7) mostramos na parte (a) a transmissividade para $\varphi = 45^{\circ}$ e na parte (b) a transmissividade para $\varphi = 135^{\circ}$ para o momento paralelo $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e campo elétrico $E = 100 \text{ kV/cm}$. Para o mínimo de $mixing$ (45°) encontramos $spin splitting$ de $0,38 \text{ meV}$ para o nível 1 e, $2,76 \text{ meV}$ para o nível 2, que são valores menores realmente que aqueles obtidos quando usamos somente contribuição de Dresselhaus; já para o $mixing$ máximo (135°) encontramos um $spin splitting$ $2,41 \text{ meV}$ para o nível 1 e $4,94 \text{ meV}$ para o nível 2, maiores que aqueles onde somente a interação spin órbita de Dresselhaus é levada em conta.

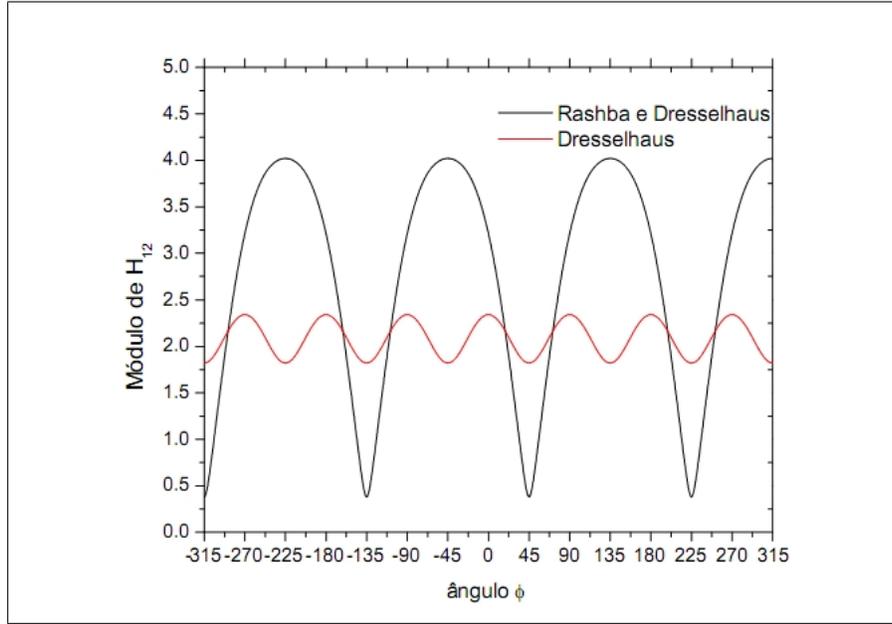


Figura 5.6: Módulo do *mixing* \mathcal{H}_{12} para o Hamiltoniano completo (linha preta) e só com termo de Dresselhaus (linha vermelha).

No cálculo da corrente de tunelamento é importante conhecermos a dependência da transmissividade com o ângulo φ . Vamos agora discutir o efeito da interação spin órbita na transmissividade de elétrons de condução em dupla barreira para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\varphi = 0^{\circ}, 30^{\circ}, 75^{\circ}$, e 90° e campo elétrico $E = 100 \text{ kV/cm}$. Na Fig.(5.8) mostramos essas transmissividades para incidência *spin up* e saída *spin up*, parte (a) e na parte (b) para incidência *spin down* e saída down.

Quando comparamos todas as transmissividades *up out* e *down out* observamos que as posições dos picos ressonantes variam fracamente com a energia para os vários valores de φ e as curvas de transmissão mudam um pouco mais nas regiões fora da ressonância (entre os dois picos).

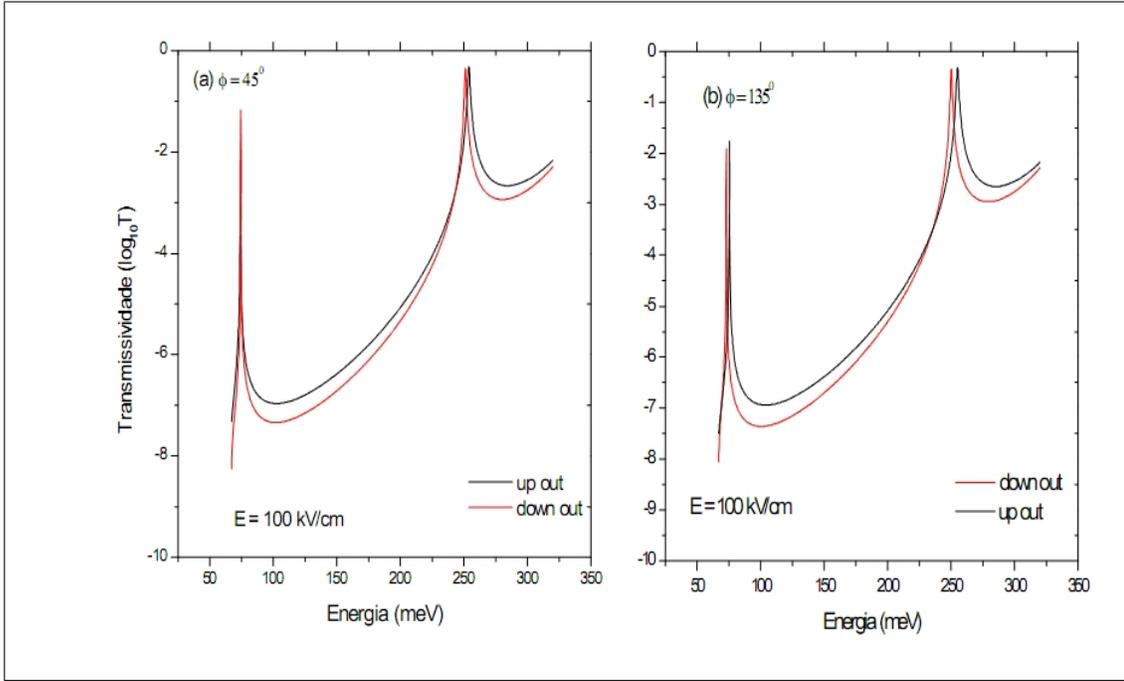


Figura 5.7: Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) de *InAs/GaSb* com $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ para campo elétrico $E = 100 \text{ kV/cm}$ com $\varphi = 45^\circ$ na parte (a) e 135° na parte (b).

5.2 Eficiência de Polarização

Nessa seção vamos discutir o efeito da interação spin órbita de Rashba-Dresselhaus na eficiência de Polarização (\mathcal{P}) dos elétrons de condução em dupla barreira de *InAs/GaSb* (100, 100, 100) para vários valores do ângulo polar φ e momento paralelo as camadas k_{\parallel} .

Na Fig.(5.9) mostramos somente o efeito de Dresselhaus (BIA) na eficiência de polarização de elétrons em função da energia em dupla barreira de *InAs/GaSb*, para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e ângulos $\varphi = 0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 75^\circ$. Para $\varphi = 0^\circ, 30^\circ, 75^\circ$ as polarizações atingem respectivamente para o primeiro nível ressonante valores de aproximadamente 69%, 78% e 70% e para o segundo nível, 87%, 93% e 88%. Para $\varphi = 45^\circ$ observamos, polarizações de quase 100% nas energias ressonantes *up* e *down* e, fora da ressonância encontramos polarização também maior, situações onde a mistura entre os estados *up* e

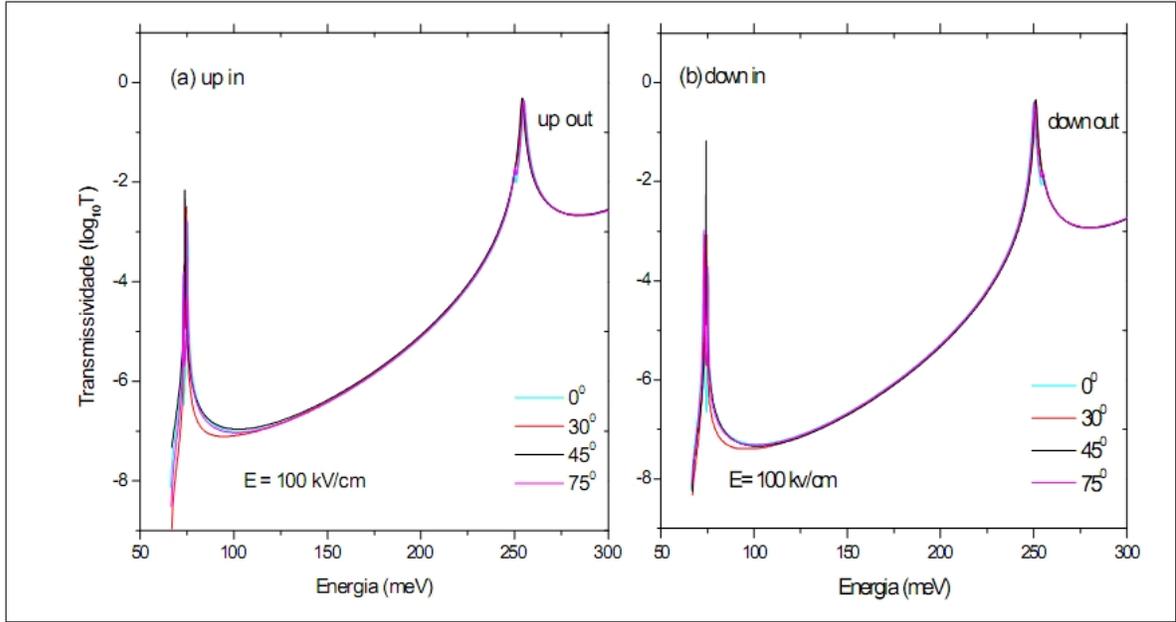


Figura 5.8: Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) de $InAs/GaSb$ para $\varphi = 0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 75^\circ$ e $k_{||} = 2 \times 10^6 cm^{-1}$ para campo elétrico $E = 100 kV/cm$. A parte (a) para up incidente e (b) para $down$ incidente.

$down$ é bem menor com maior filtragem $spin\ up$ para baixas energias.

Na Fig.(5.10) mostramos o efeito combinado Rashba (SIA) + Dresselhaus (BIA) na spin polarização para os campos $E = 0, 40\ kV/cm$ e $100\ kV/cm$, $\varphi = 30^\circ$ e momento paralelo $2 \times 10^6\ cm^{-1}$. Podemos observar que a eficiência de polarização para campo zero com somente contribuição de Dresselhaus (linha preta) atinge os valores de $77\% \rightarrow 78\%$ no primeiro nível ressonante e valores, $92\% \rightarrow 94\%$ para o segundo nível; já para $E = 40\ kV/cm$ (linha azul) a eficiência de polarização atinge valores de $64\% \rightarrow 79,6\%$ para o primeiro nível e $90\% \rightarrow 93\%$ para o segundo nível; para $E = 100\ kV/cm$ (vermelho) encontramos uma eficiência de polarização entre $8,3\% \rightarrow 44,7\%$ para o primeiro nível fundamental e $82,3\% \rightarrow 87,7\%$ para o segundo nível.

Essa redução na eficiência de polarização com a inclusão do termo SIA, vem do fato de que para $\varphi = 30^\circ$ o aumento do campo elétrico produz uma mistura maior dos estados

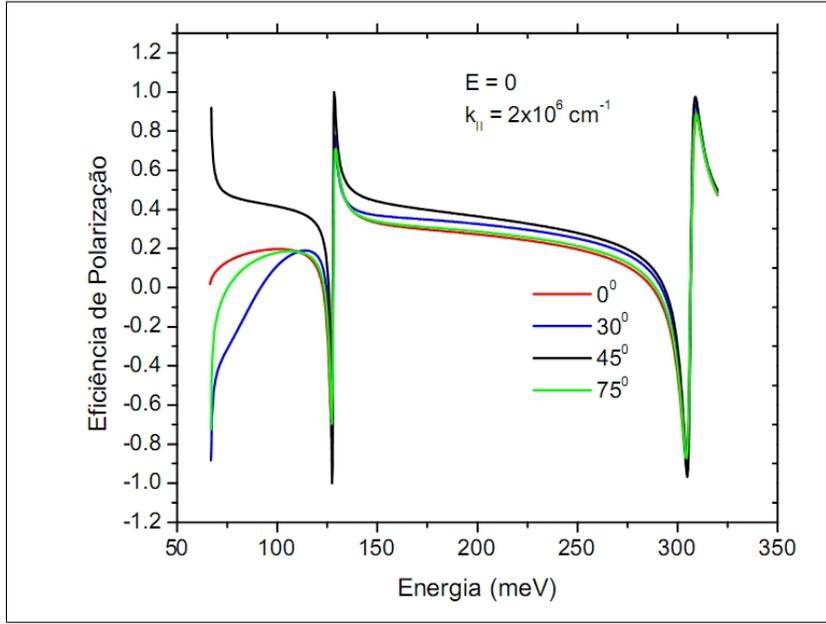


Figura 5.9: Eficiência de Polarização em função da energia em heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) para $\varphi = 0^{\circ}, 30^{\circ}, 45^{\circ}, 75^{\circ}$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ com somente termo BIA com campo elétrico nulo.

up e *down* e as transmissividades *up out* e *down out* ficam bem mais próximas, como pode ser verificado na Fig.(5.11). Essas polarizações podem ser aumentadas quando $\varphi = 45^{\circ}, 135^{\circ}$ onde o termo quadrático de Dresselhaus é nulo e as componentes $T_{\uparrow\downarrow}$ e $T_{\downarrow\uparrow}$ não contribuem.

Na Fig.(5.12) mostramos essa situação para campos elétricos $E = 0, 40 \text{ kV/cm}$ e 100 kV/cm e momento paralelo $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\varphi = 45^{\circ}$, onde para o nível básico observamos que as polarizações atingem 100%.

Na Fig.(5.13) mostramos o efeito do momento paralelo na eficiência de polarização para dupla barreira de *InAs/GaSb* (100, 100, 100), para $\varphi = 30^{\circ}$ e campo elétrico nulo. O aumento de k_{\parallel} provoca um aumento da energia crítica E_{c4} e das energias ressonantes no plano paralelo às camadas e, como consequência, os máximos de polarização se deslocam para a direção de maiores energias ocorrendo uma diminuição da eficiência de polarização de quase 40% para o primeiro nível ressonante quando k_{\parallel} muda de $1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ para 3

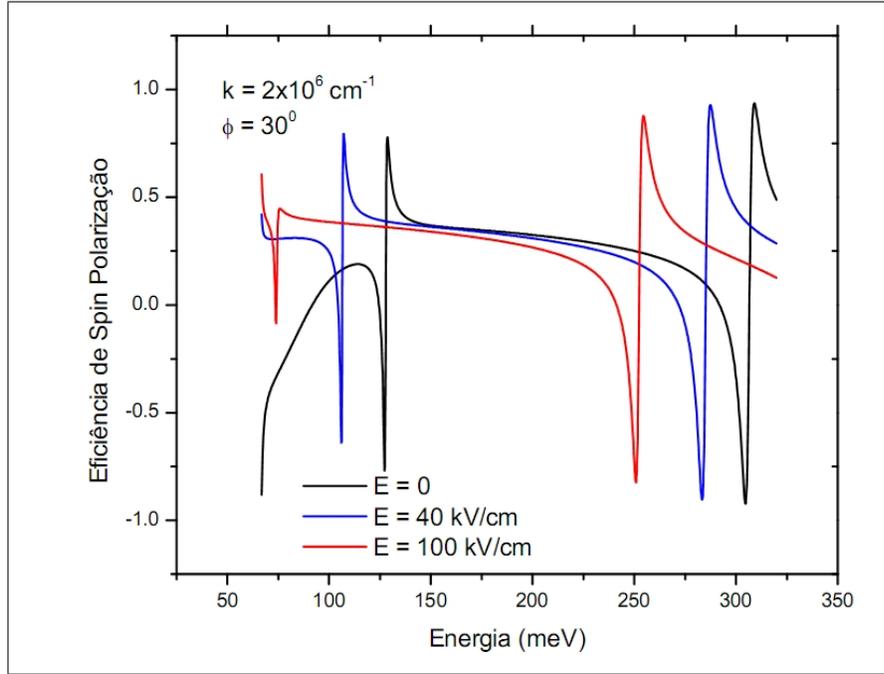


Figura 5.10: Eficiência de Polarização em função da energia em heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) para $\varphi = 30^0$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ para campos elétricos $E = 0$ (linha preta), 40 kV/cm (linha azul) e 100 kV/cm (linha vermelha).

$\times 10^6 \text{ cm}^{-1}$.

Para finalizar mostramos na Fig.(5.14) a eficiência de polarização e a transmissividade em dupla barreira de *InAs/GaSb* para $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $\varphi = 0^0$ para outras larguras da barreira e poço; na parte (a) para uma dupla barreira de *InAs/GaSb* (50, 100, 50) e na parte (b) para (30, 60, 30). Na parte (a) onde apenas diminuimos a largura das barreiras, as posições dos picos ressonantes continuam nas mesmas posições que nos casos anteriores como na Fig.(5.9), com aumento na transmissividade, mas uma diminuição na eficiência de polarização. Para o sistema (30, 60, 30) e potencial da barreira de 320 meV , existe apenas um estado quase ligado no poço que se separa em estados *up* e *down* com a inclusão da interação spin órbita. Com a diminuição da largura do poço esses estados são menos ligados e as transmissividades *up out* e *down out* são maiores e mais largas, o que implica em um tempo de vida menor dos elétrons que sofrem menos influência da

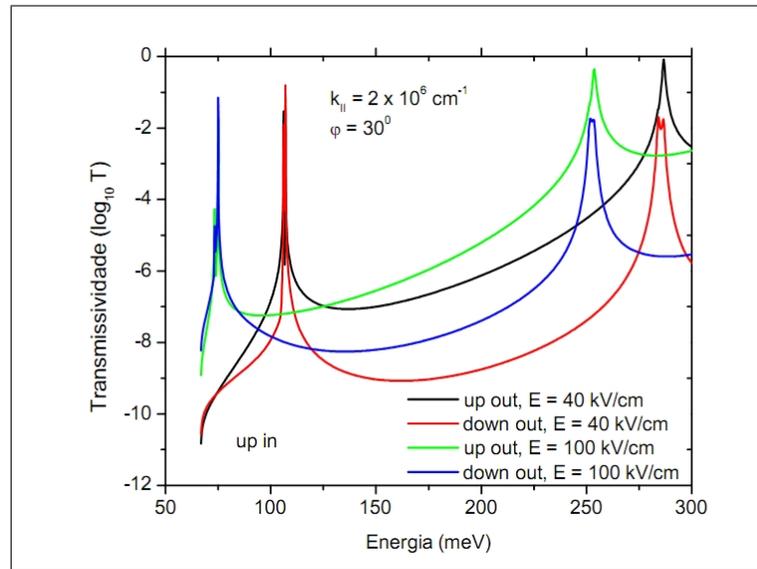


Figura 5.11: Transmissividade de elétrons polarizados através de uma heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) de *InAs/GaSb* com $\varphi = 30^\circ$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ para incidência *spin up*.

interação spin órbita com uma menor eficiência de polarização.

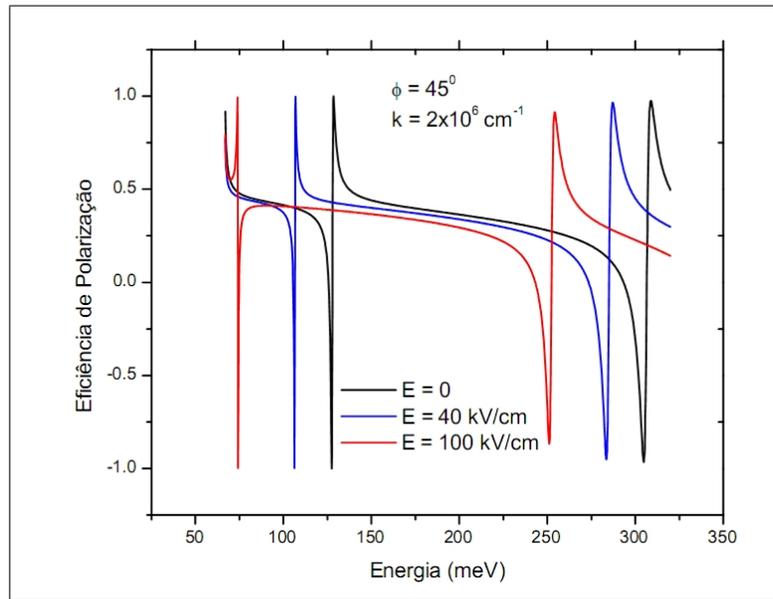


Figura 5.12: Eficiência de Polarização em função da energia em heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) para $\varphi = 45^\circ$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ para campos elétricos $E = 0$ (linha preta), 40kV/cm (linha azul) e 100kV/cm (linha vermelha).

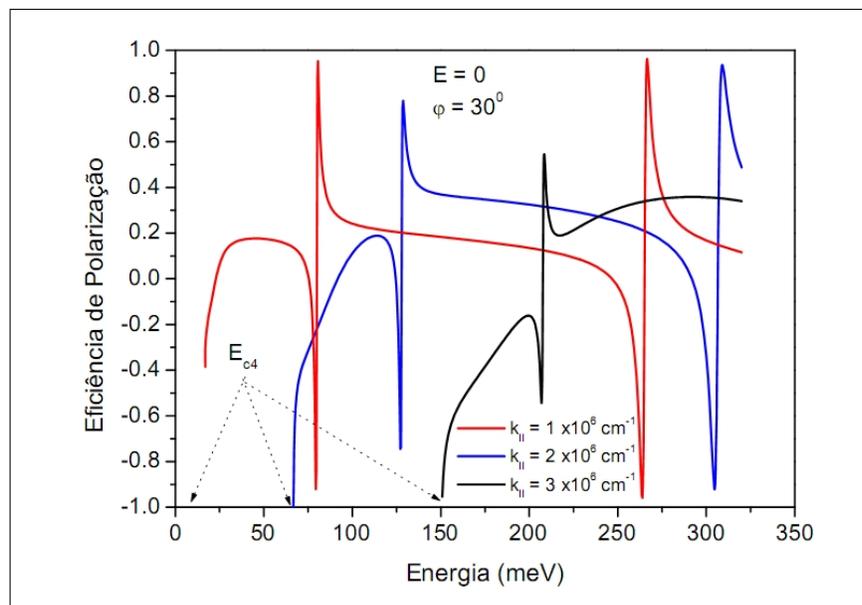


Figura 5.13: Eficiência de Polarização em função da energia em heteroestrutura de dupla barreira (100, 100, 100) para $\varphi = 30^\circ$ e $k_{\parallel} = 1, 2, 3 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ para campo elétrico $E = 0$.

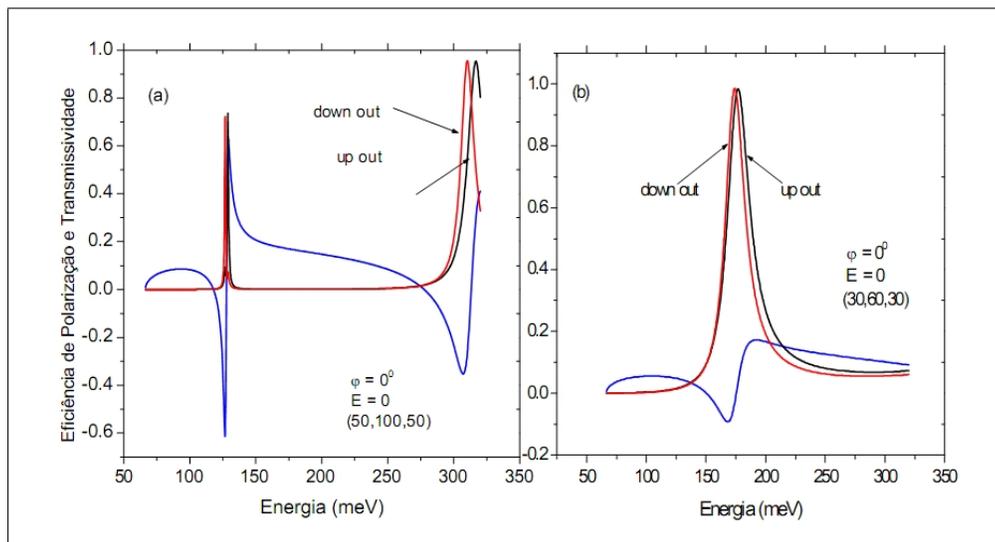


Figura 5.14: Eficiência de Polarização em função da energia em heteroestrutura de dupla barreira para $\varphi = 0^0$ e $k_{\parallel} = 2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ e para campo elétrico $E = 0$ para as larguras (50, 100, 50) na parte (a) e (30, 60, 30) na parte (b).

Capítulo 6

Corrente de Tunelamento de Elétrons com Spins Polarizados

Neste capítulo calcularemos a corrente de tunelamento de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante *InAs/GaSb* e discutiremos o efeito da interação spin órbita Rashba e Dresselhaus nas características $I \times V$. A estrutura de dupla barreira é mostrada na Fig.(6.1), com o poço de *InAs* e a barreira de *GaSb* sanduichada entre dois eletrodos de *InAs*. Aqui, iremos considerar o tunelamento no regime coerente, desprezando todos os processos de espalhamento. Supomos o poço e a barreira não dopados, enquanto os eletrodos têm dopagem tipo *n*. Assim no cálculo da corrente, simplesmente assumimos que não existe queda de voltagem através dos eletrodos (potencial *flat*) e que não existe efeito espaço carga na região do poço que podem modificar o campo elétrico local e modificar os estados quase ligados. Assim de acordo com a Fig.(6.1) para campo elétrico nulo, o nível de Fermi E_F no emissor e coletor são iguais, e não existe corrente elétrica. Quando uma voltagem V é aplicada entre os eletrodos, o nível de Fermi no coletor é abaixado de eV . Dessa forma, criam-se níveis vazios entre $E_F - eV$ (no coletor) e E_F (no emissor) e é estabelecido uma corrente elétrica.

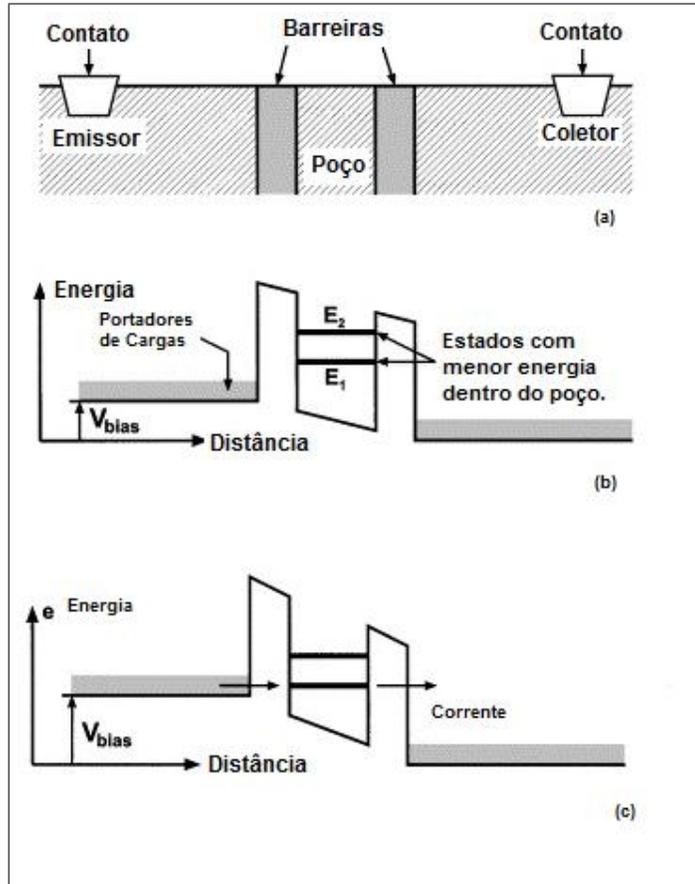


Figura 6.1: (a) Esquema de montagem de uma heteroestrutura em dupla barreira; (b) Dupla barreira ressonante, mostrando os efeitos da dopagem; (c) Efeito da aplicação do campo elétrico na dupla barreira.

6.1 Densidade de Corrente Spins Polarizados

Se for desconsiderada a mistura entre os estados de condução, os elétrons *up* e *down* podem ser tratados como partículas independentes. Nessa aproximação, chamada de parabólica, a corrente de tunelamento pode ser escrita como

$$\mathbf{J}_{\uparrow,\downarrow} = \frac{e}{8\pi^3} \int_{k_z > 0} d^3\mathbf{k} [f(E) - f(E - eV)] T(\mathbf{k}) \frac{\hbar k_z}{m}, \quad (6.1)$$

onde $f(E)$ é a função de distribuição de Fermi-Dirac e $\frac{\hbar k_z}{m}$ é a velocidade de grupo na direção z . A corrente total é obtida pela integração de todos os estados incidentes no emissor no espaço dos momentos. Entretanto no nosso problema, existem termos de Dresselhaus e Rashba fora da diagonal do Hamiltoniano e, para cada incidência de spins *up* ou *down* na região do emissor, temos dois canais de tunelamento *up out* e *down out* na região do emissor. Dessa forma, a corrente para incidência *up* e *down* podem ser escritas como:

$$\mathbf{J}_\uparrow = \frac{e}{8\pi^3} \int_{\Omega_\uparrow} d^3\mathbf{k} [f(E) - f(E - eV)] [T_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) + T_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})] v_{z\uparrow}(\mathbf{k}), \quad (6.2)$$

$$\mathbf{J}_\downarrow = \frac{e}{8\pi^3} \int_{\Omega_\downarrow} d^3\mathbf{k} [f(E) - f(E - eV)] [T_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}) + T_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k})] v_{z\downarrow}(\mathbf{k}), \quad (6.3)$$

onde a velocidade de grupo v_z é obtida da relação de dispersão $\frac{\partial E}{\partial k_z} = \hbar v_z$ e, as regiões de integração Ω_\uparrow e Ω_\downarrow correspondem à região (i) da Tab.(4.1) para o qual $E_\uparrow, E_\downarrow > E_{c4}$ correspondendo a valores reais de $k_{z\uparrow}$ e $k_{z\downarrow}$, isto é:

$$\Omega_\uparrow = \{ (k_\parallel, k_z, \varphi) \mid E_F > E_\uparrow > E_{c4} \}, \quad (6.4)$$

$$\Omega_\downarrow = \{ (k_\parallel, k_z, \varphi) \mid E_F > E_\downarrow > E_{c4} \}, \quad (6.5)$$

onde E_F é o nível de Fermi. Na aproximação utilizada, o potencial é *flat* no emissor e coletor e portanto não há interação de Rashba nessas regiões, o que implica a não existência da região (iii) da Tab.(4.1); a região (ii) ainda existe, mas como mostra a Fig.(6.2) é uma região bastante estreita da ordem de $0,15 \text{ meV}$ para energia de Fermi $E_F = 20 \text{ meV}$ e $0,67 \text{ meV}$ para $E_F = 55 \text{ meV}$, sendo desconsiderada. Podemos ainda escrever para $T = 0$ a corrente total como

$$J_\sigma = \int_0^{2\pi} J_{s_\varphi} d\varphi, \quad (6.6)$$

onde as componentes $J_{s\varphi}$ para incidência $\sigma = \uparrow$ (*up*) e \downarrow (*down*) são respectivamente

$$\mathbf{J}_{\uparrow\varphi} = \frac{e}{8\pi^3} \int_{k_{\parallel i}}^{k_{\parallel f}} k_{\parallel} dk_{\parallel} \int_{k_{zi}}^{k_{zf}} dk_z [T_{\uparrow\uparrow}(k_{\parallel}, k_z) + T_{\uparrow\downarrow}(k_{\parallel}, k_z)] v_{z\uparrow}(\mathbf{k}) \quad (6.7)$$

e

$$\mathbf{J}_{\downarrow\varphi} = \frac{e}{8\pi^3} \int_{k_{\parallel i}}^{k_{\parallel f}} k_{\parallel} dk_{\parallel} \int_{k_{zi}}^{k_{zf}} dk_z [T_{\downarrow\downarrow}(k_{\parallel}, k_z) + T_{\downarrow\uparrow}(k_{\parallel}, k_z)] v_{z\downarrow}(\mathbf{k}) \quad (6.8)$$

cada uma dessas correntes têm duas componentes *up* e *down*. Assim para cada incidência σ temos

$$J_{\sigma} = J_{\sigma \rightarrow \sigma} + J_{\sigma \rightarrow \sigma'}. \quad (6.9)$$

Desta forma, para incidência de spin *up* no emissor temos as correntes componentes $J_{\uparrow\uparrow}$, $J_{\downarrow\uparrow}$ e para incidência *down* $J_{\downarrow\downarrow}$ e $J_{\uparrow\downarrow}$. A spin polarização pode ser definida como

$$P = \frac{J_{\uparrow\uparrow} + J_{\downarrow\uparrow} - J_{\uparrow\downarrow} - J_{\downarrow\downarrow}}{J_{\uparrow\uparrow} + J_{\downarrow\uparrow} + J_{\uparrow\downarrow} + J_{\downarrow\downarrow}}. \quad (6.10)$$

A Fig.(6.2), mostra o esquema para a determinação dos limites de integração $k_{\parallel i}$ e $k_{\parallel f}$ da variável k_{\parallel} , em função da energia crítica E_{c4} . Deve-se observar que para $E_F - eV \leq 0$, $k_{\parallel i} = 0$. Para se determinar os limites de k_{zi} , k_{zf} da variável k_z usa-se a expressão para k_z definida na Eq.(4.17), para os valores da energia e momento lateral correspondentes.

As próximas seções, apresentam resultados para corrente de tunelamento e polarização de spin para dupla barreira de *InAs/GaSb* em duas configurações: (30, 60, 30) \AA , (50, 100, 50) \AA .

6.2 Corrente de Tunelamento e Spin Polarização para (30,60,30)

Nessa seção vamos discutir o efeito da interação spin órbita de Rashba-Dresselhaus na corrente de tunelamento de elétrons polarizados e Spin Polarização em dupla barreira

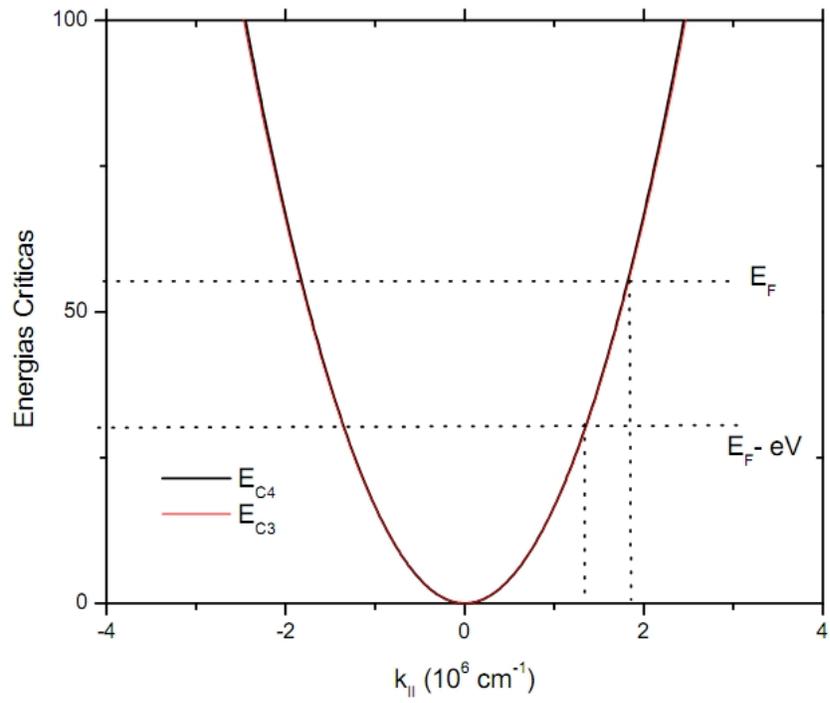


Figura 6.2: Energias críticas E_{c3} e E_{c4} mostrando os limites de integração para o momento paralelo.

de $InAs/GaSb$ (30, 60, 30) \AA com diferentes n\u00edveis de dopagem; as dimens\u00f5es menores foram escolhidas para diminuir os esfor\u00e7os computacionais no c\u00e1lculo da corrente.

Na Fig.(6.3a), mostramos a densidade de corrente $up\ out$ e $down\ out$ em fun\u00e7\u00e3o do potencial U para $spin\ up$ incidente ($up\ in$) e energia de Fermi $E_F = 20meV$ e, na Fig.(6.3b) para $spin\ down$ incidente, ambas com somente efeito de Dresselhaus (BIA). Em ambos os casos, podemos observar que a corrente total (parcial) para cada incid\u00eancia tem praticamente as mesmas intensidades na regi\u00e3o de resson\u00e2ncia. Observa-se que, a corrente dominante para cada situa\u00e7\u00e3o, depende do portador incidente. Assim, para entrada $spin\ up\ in$, a contribui\u00e7\u00e3o maior vem dos el\u00e9trons com $spin\ up$ e, para entrada $spin\ down$ a contribui\u00e7\u00e3o maior vem dos el\u00e9trons com $spin\ down$. O alargamento das curvas, prov\u00e9m da resson\u00e2ncia dentro do po\u00e7o dos estados up e $down$ quando h\u00e1 alinhamento com o n\u00edvel de Fermi do emissor. Como mostrado na Fig.(5.14), para a dupla barreira de $InAs/GaSb$ com as larguras (30, 60, 30) os picos nas transmissividades s\u00e3o largos, fato que \u00e9 refletido na corrente quando essas transmiss\u00f5es s\u00e3o integradas. Para visualizar o potencial U onde ocorre o tunelamento ressonante, mostramos na Fig.(6.4a) as correntes de sa\u00edda $up\ out$ e $down\ out$ para as incid\u00eancias up e $down$ respectivamente e, na parte (b) as correntes de menor intensidade $up\ out$ e $down\ out$ para incid\u00eancia $down\ in$ e $up\ in$ respectivamente. As resson\u00e2ncias up e $down$ devido a intera\u00e7\u00e3o spin \u00f3rbita acontecem respectivamente para os potenciais de $189,97meV$ e $187,43meV$ que corresponde a uma separa\u00e7\u00e3o $\Delta U = 2,54meV$. Assim como indica a parte (a), o primeiro pico \u00e9 $down$ (linha vermelha) e o segundo \u00e9 up (linha preta).

Na Fig.(6.5a), mostramos a densidade de corrente $up\ out$ e $down\ out$ em fun\u00e7\u00e3o do potencial U para $spin\ up$ incidente ($up\ in$) e energia de Fermi $E_F = 20meV$ e, na Fig.(6.5b) para $spin\ down$ incidente, ambas para o combinado BIA + SIA. Como n\u00e3o existe contribui\u00e7\u00e3o do termo SIA no emissor e coletor, os limites de integra\u00e7\u00e3o para os momentos paralelos s\u00e3o os mesmos que no caso BIA e, portanto as curvas $up\ out$ e $down\ out$ apresentam as mesmas caracter\u00edsticas como da Fig.(6.3). Com a inclus\u00e3o do termo SIA na regi\u00e3o do po\u00e7o, podemos esperar um pequeno aumento na separa\u00e7\u00e3o ΔU dos

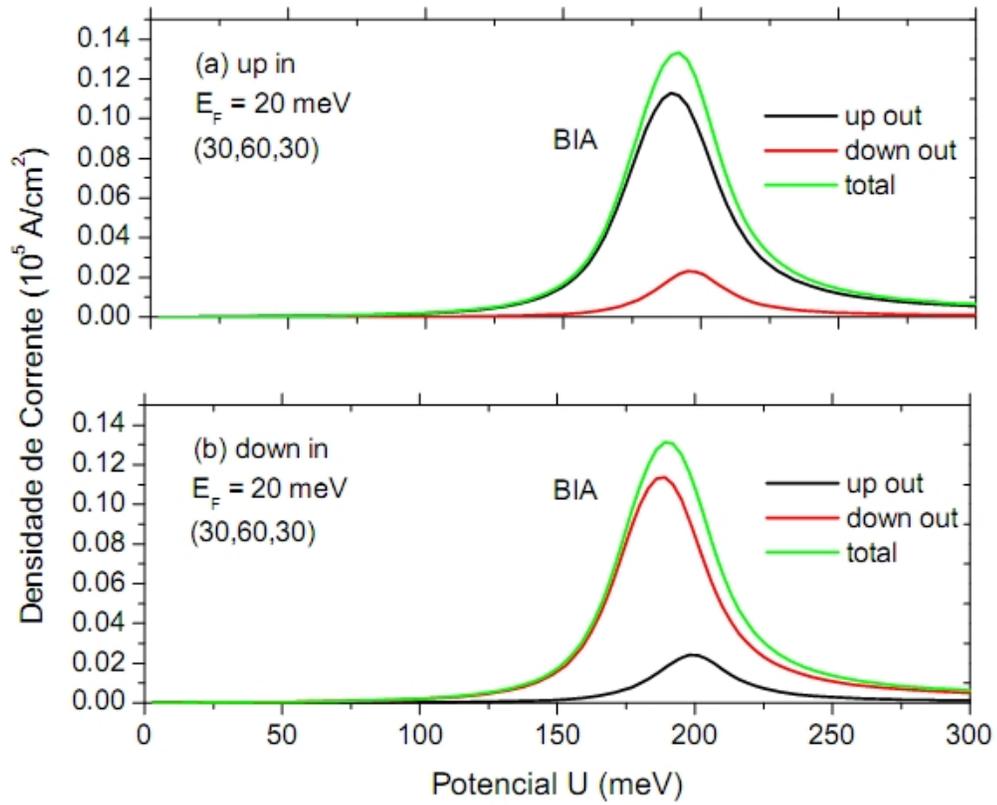


Figura 6.3: Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ para $E_F = 20\text{meV}$. (a) Elétrons up incidente e (b) elétrons $down$ incidente com somente termo BIA.

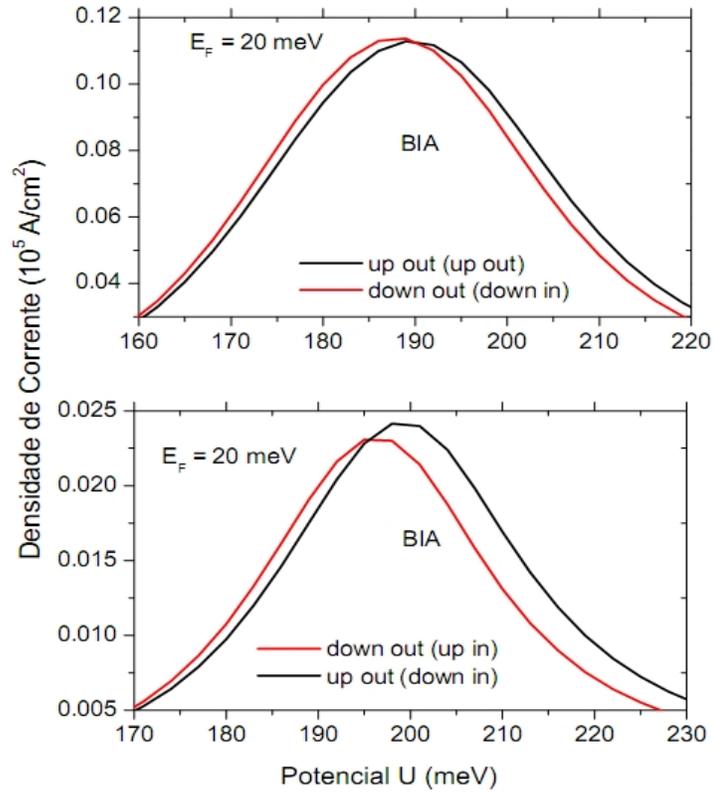


Figura 6.4: Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de *InAs/GaSb* para $E_F = 20 \text{ meV}$. (a) *up out* para incidência *up*, e *down out* para incidência *down* (b) *up out* para incidência *down*, e *down out* para incidência *up* com somente termo BIA.

potenciais ressonantes; isso pode ser observado na Fig.(6.6), onde mostramos na parte (a) as correntes *up out* e *down out* para as incidências *up in* e *down in* respectivamente e, na parte (b) as correntes de menor intensidade *up out* e *down out* para incidência *down in* e *up in* respectivamente. As ressonâncias *up* e *down* para as respectivas incidências para o combinado BIA + SIA acontecem respectivamente para os potenciais de $190,72meV$ e $187,85meV$ que correspondem a uma separação $\Delta U = 2,87meV$; diferentemente do termo BIA, na parte (b) com a inclusão dos dois termos (BIA + SIA) as correntes de menor intensidade para incidências invertidas sofrem uma separação em energia da ordem de $6meV$ no pico ressonante em relação aos picos da parte (a) da Fig.(6.6).

Na Fig.(6.7a), comparamos os efeitos BIA e SIA + BIA na densidade de corrente *up out* e *down out* em função do potencial U para *spin up* incidente (*up in*) e energia de Fermi $E_F = 20meV$ e, na Fig.(6.7b) para *spin down* incidente. Podemos observar dessas figuras que, a contribuição BIA + SIA aumenta fracamente as correntes *up* e *down out* para incidência *spin up* e *down* respectivamente, em compensação diminui as componentes *up out* e *down out* para as incidências *down* e *up* respectivamente. Assim, para esse nível de dopagem, $E_F = 20meV$, encontramos pouca variações nas correntes quando usamos a contribuição BIA e BIA + SIA; isso pode ser verificado na spin polarização que são quase idênticas como mostra a Fig. 6.8), onde observamos baixas polarizações na faixa de 4% (*down*) \rightarrow 8% (*up*). Como já salientamos no capítulo anterior, a diminuição das larguras da dupla barreira, produz uma diminuição na eficiência de polarização para transmissividades, o mesmo acontecendo para a corrente de spin polarização.

Na Fig.(6.9), mostramos a densidade de corrente *up out* e *down out* em função do potencial U , com somente termo BIA nas partes (a) e (b) e, termos BIA + SIA nas partes (c) e (d) para energia de Fermi $E_F = 55meV$. De imediato, podemos observar que para essa dopagem maior, ocorre um aumento considerável das correntes de tunelamento *up out* e *down out* para ambas as entradas (*up in* e *down in*) com e sem interação Rashba. Com o aumento da dopagem o *mixing* é muito mais pronunciado, os picos nas correntes *up out* e *down out* são distorcidos e mais separados comparado com a dopagem anterior,

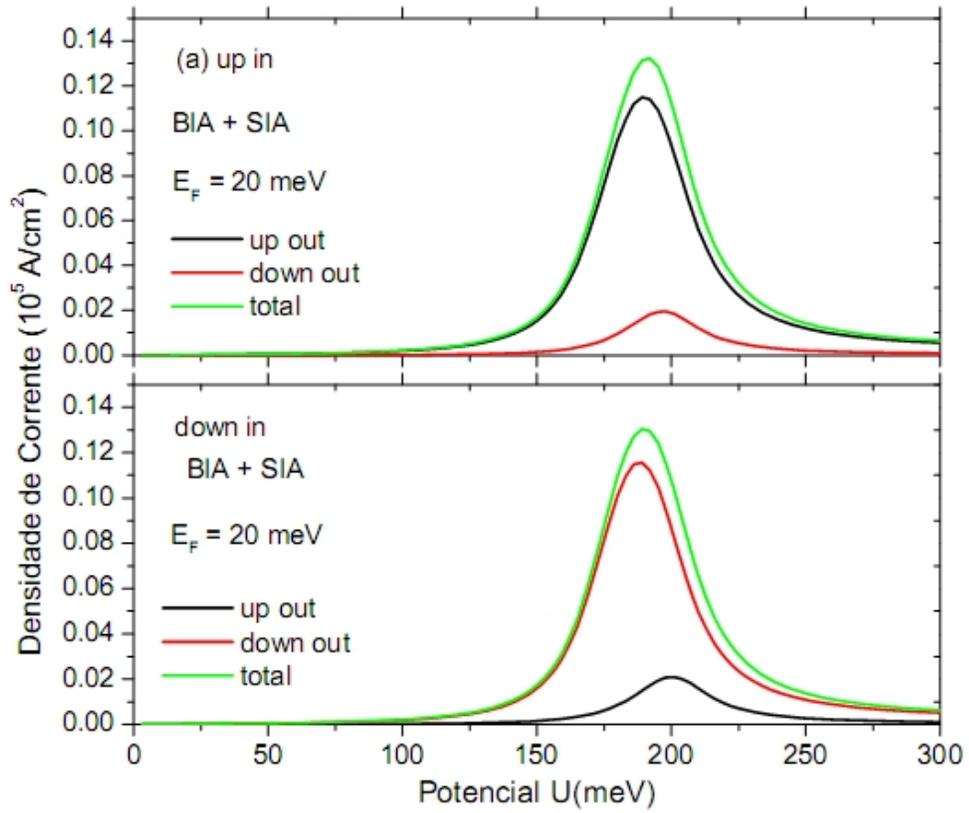


Figura 6.5: Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de *InAs/GaSb* para $E_F = 20\text{ meV}$. (a) Elétrons *up* incidente e (b) elétrons *down* incidente com termos BIA + SIA.

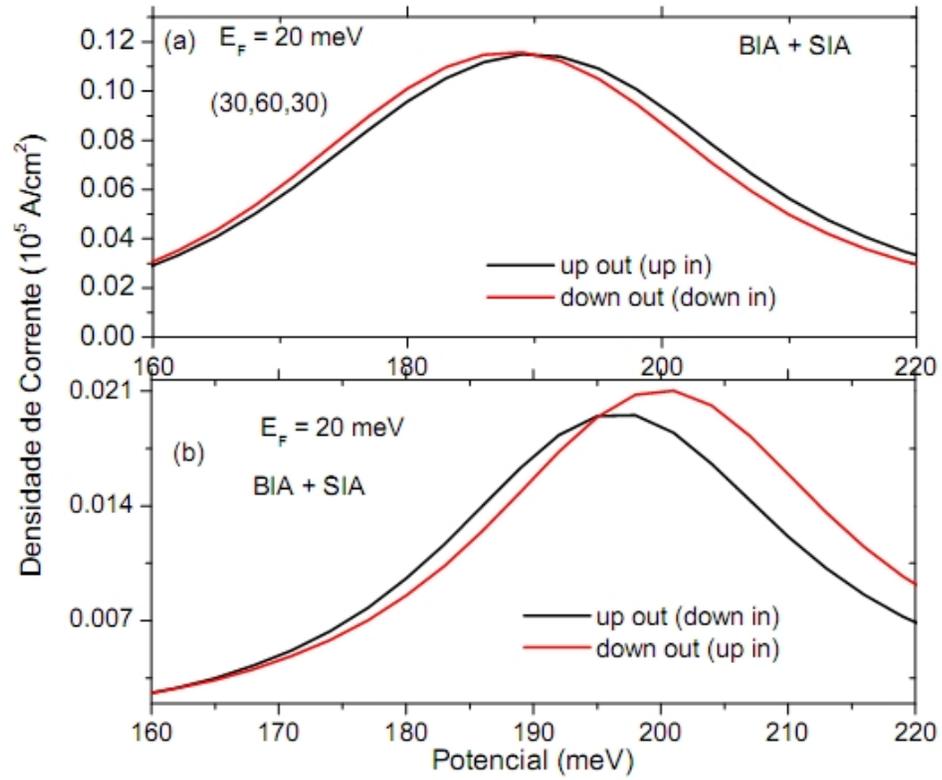


Figura 6.6: Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ para $E_F = 20 \text{ meV}$. (a) *up out* para incidência *up*, e *down out* para incidência *down* (b) *up out* para incidência *down*, e *down out* para incidência *up* com termos BIA + SIA.

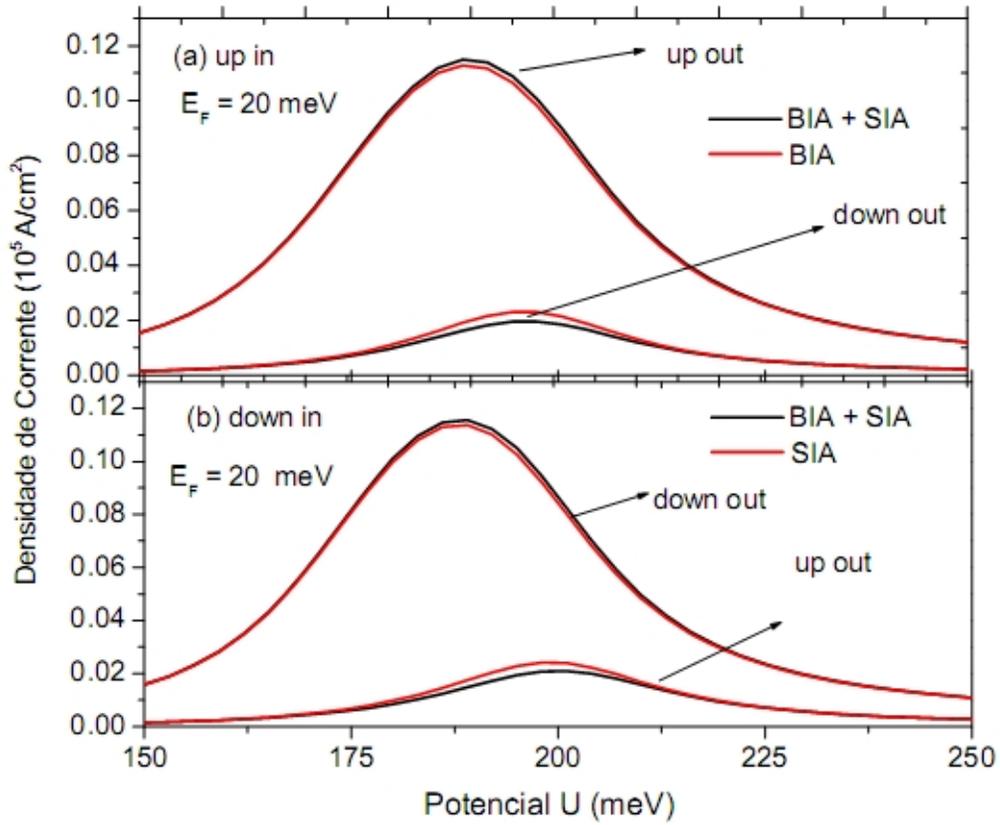


Figura 6.7: Efeitos da interação BIA + SIA nas correntes *up out* e *down out* em dupla barreira ressonante para elétron *up* incidente (a) e *down* incidente (b).

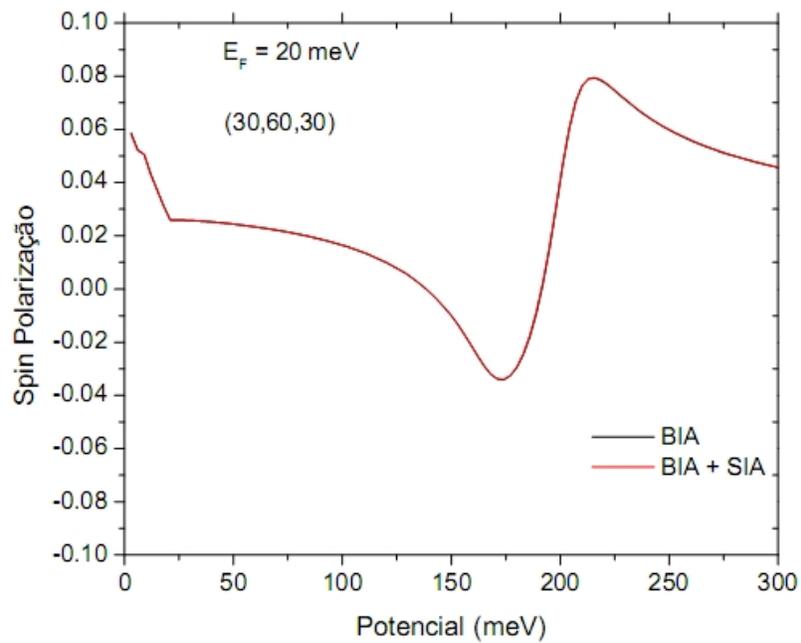


Figura 6.8: Spin Polarização de elétrons em dupla barreira ressonante de *InAs/GaSb* com larguras (30, 60, 30) Å para $E_F = 20 \text{ meV}$ com os efeitos da interação BIA (linha preta) e BIA + SIA (linha vermelha).

provocando um pequeno aumento da spin polarização. Como mostra a Fig. (6.10), para baixos potenciais, entre 0 e $9meV$ temos polarização na faixa de 20% e, conforme o potencial aumenta, aumenta a mistura e diminui a spin polarização na região fora da ressonância; na ressonância a polarização atinge o valor de 11% com somente termo BIA e 13% com o termo BIA + SIA.

6.3 Corrente de Tunelamento e Spin Polarização para (50,100,50)

A Fig.(6.11a), mostra as densidade de correntes parciais *down out* e *up out* em função do potencial U para *spin down* incidente (*up in*) para a energia de Fermi $E_F = 20meV$ e na Fig.(6.11b) para *spin up*, para a completa interação BIA + SIA em uma dupla barreira ressonante de *InAs/GaSb* com as larguras (50, 100, 50) Å. Nessa situação ocorre uma diminuição nas intensidades da densidade de corrente em comparação com a configuração (30, 60, 30) Å (veja a Fig.6.5) para a mesma energia de Fermi, o *mixing* é baixo e os picos de tunelamento são mais pronunciados e mais facilmente identificados, como no primeiro pico onde podemos ver uma pequena abertura devido a interação spin órbita que separa os estados do poço *up* e *down*. Podemos ainda observar, que a corrente total para incidência *up* [parte (a)] é maior que a corrente total para incidência *down* [parte (b)] para o primeiro pico; isso implica numa maior spin polarização para os elétrons com *spin up*. Isso pode ser visto claramente na spin polarização mostrada na Fig.(6.12), onde a polarização atinge um valor de 45% para o potencial $U = 114meV$, bem maior que as situações anteriores onde as dimensões do sistema eram menores. Para potenciais maiores, a polarização decresce, atingindo no segundo pico uma polarização de 6,8% para elétrons *down* em $U = 432meV$ e 11% para elétrons *up* para $U = 474meV$. Assim a separação dos picos *up* e *down*, "mascarados" no cálculo da corrente são melhor visualizados no cálculo da spin polarização.

A Fig(6.13a) mostra a saída *up* e *down* para a incidência *up* em função do potencial U

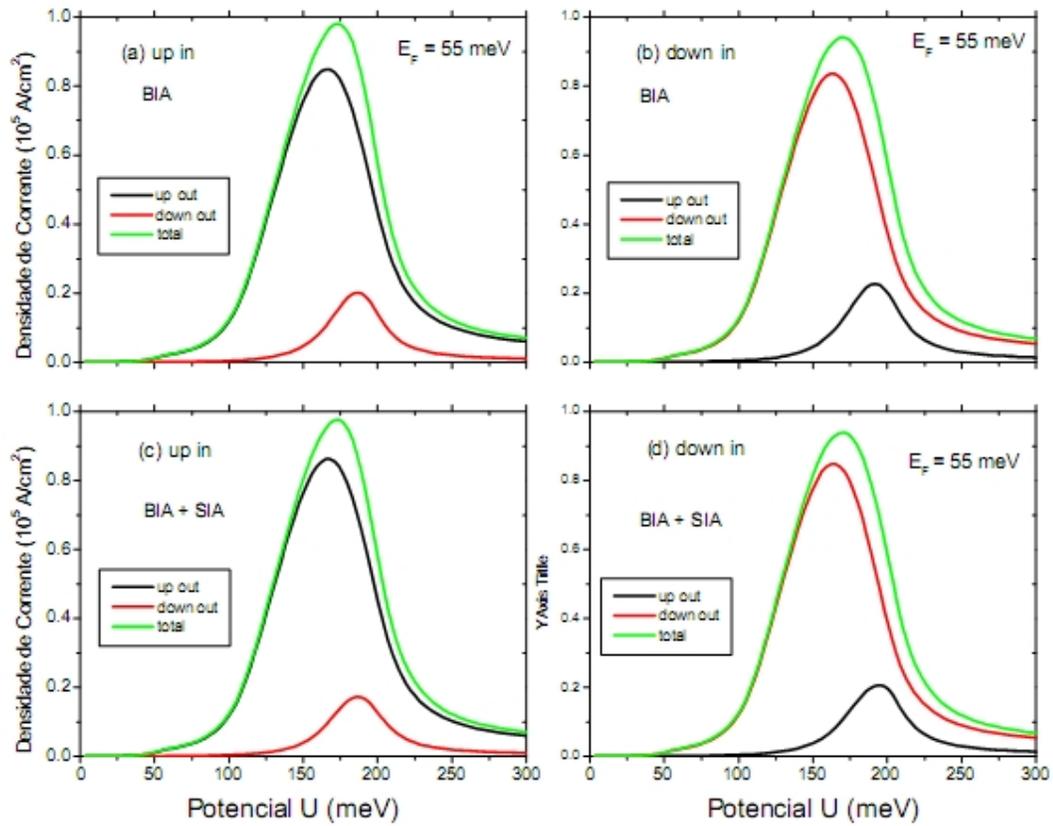


Figura 6.9: Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ para $E_F = 55 \text{ meV}$ com somente termo BIA na parte (a) para $spin \text{ up}$ incidente e na parte (b) $spin \text{ down}$ incidente e com termo BIA + SIA nas parte (c) e (d) para incidências up e $down$ respectivamente.

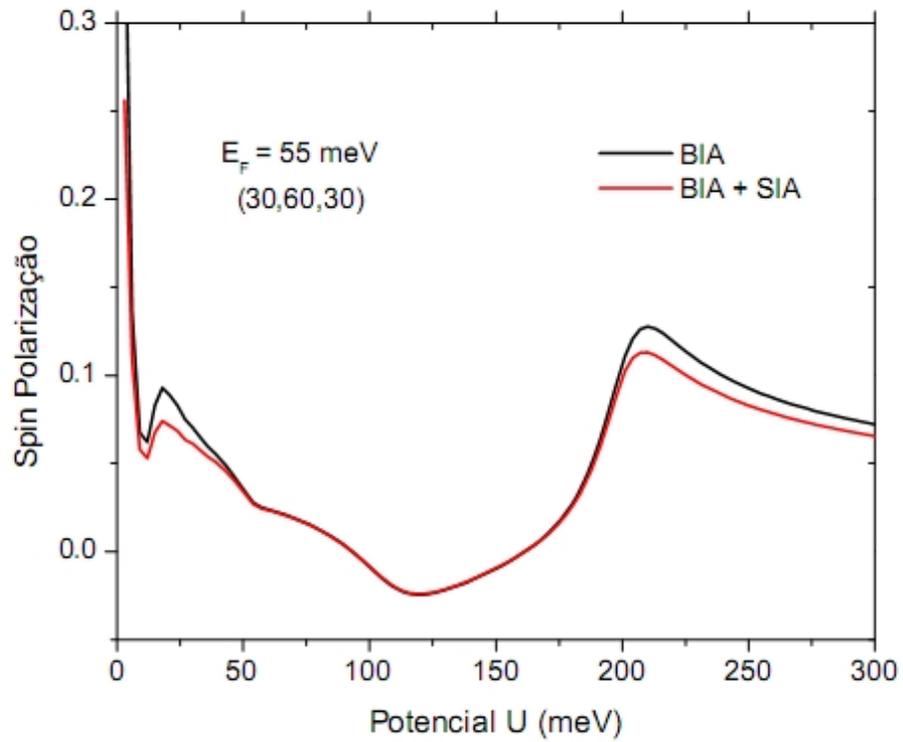


Figura 6.10: Spin Polarização de elétrons em dupla barreira ressonante de *InAs/GaSb* com larguras (30, 60, 30) Å para $E_F = 55 \text{ meV}$ com os efeitos da interação BIA (linha preta) e BIA + SIA (linha vermelha).

para o Hamiltoniano completo e, nas parte (b) para *spin up* incidente para $E_F = 55meV$. Com o aumento da dopagem as magnitudes são maiores em comparação com os casos onde $E_F = 20meV$, o *mixing* é maior, distorcendo e separando mais os picos das componentes das correntes de menor intensidade, *up out* (linha preta) para elétrons *down* incidente e *down out* (linha vermelha) para elétrons *down* incidente. Esse maior *mixing* produz um aumento da spin polarização em comparação com o caso anterior, $E_F = 20meV$; isso é mostrado na Fig.(6.12) onde para o primeiro pico, a polarização atinge um valor de 54% com somente termo BIA e 47% com o termo BIA + SIA para os elétrons *spin up*. As polarizações BIA e SIA são praticamente idênticas, mudando mais claramente na região ressonante.

Para finalizar, devemos salientar que o aumento das dimensões das barreiras e poço, confina muito mais o primeiro nível quase ligado na região do poço e, por isso aparece pequenas oscilações no cálculo da corrente, fato que poderia ser corrigido diminuindo o intervalo de integração da energia, o que evidente aumentaria os esforços computacionais no cálculo da corrente. Na Fig.(6.14) mostramos a spin polarização para larguras (100, 100, 100) para $E_F = 20meV$ onde essas oscilações são bem maiores, mas ainda assim podemos estimar as polarizações dos elétrons *up* e *down* para o primeiro nível; para essas larguras temos spin polarização de 18% *down* e 71% *up* na mesma faixa das eficiências de polarização vista no capítulo anterior.

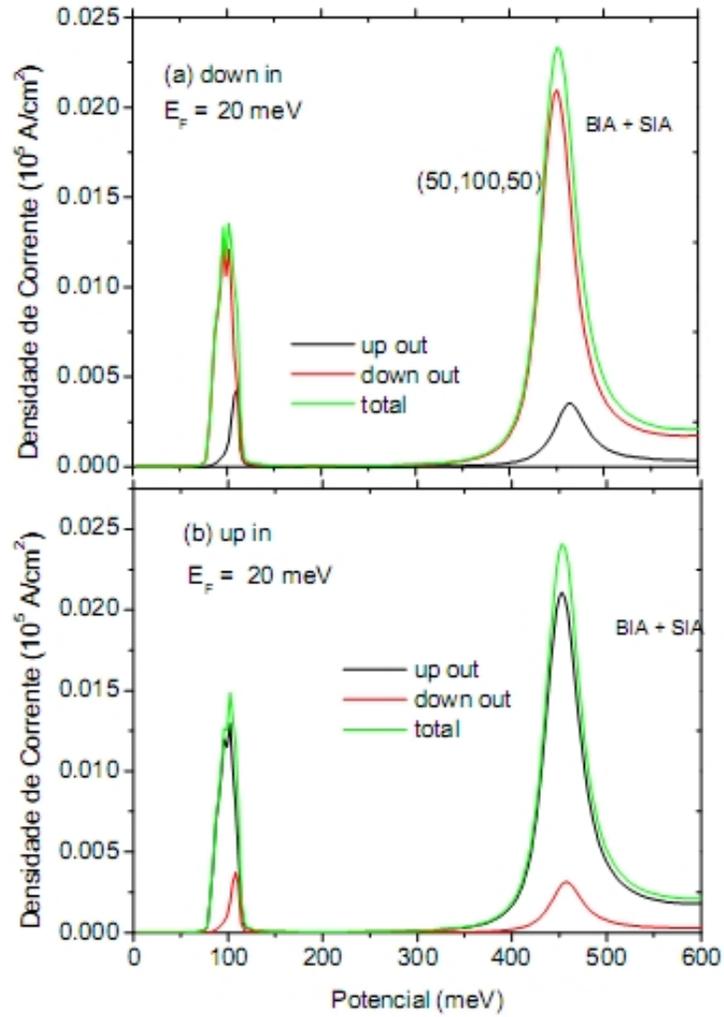


Figura 6.11: Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ (50, 100, 50) Å para $E_F = 20\text{meV}$ com o termo BIA + SIA na parte (a) para *spin up* incidente e na parte (b) para *spin down* incidente.

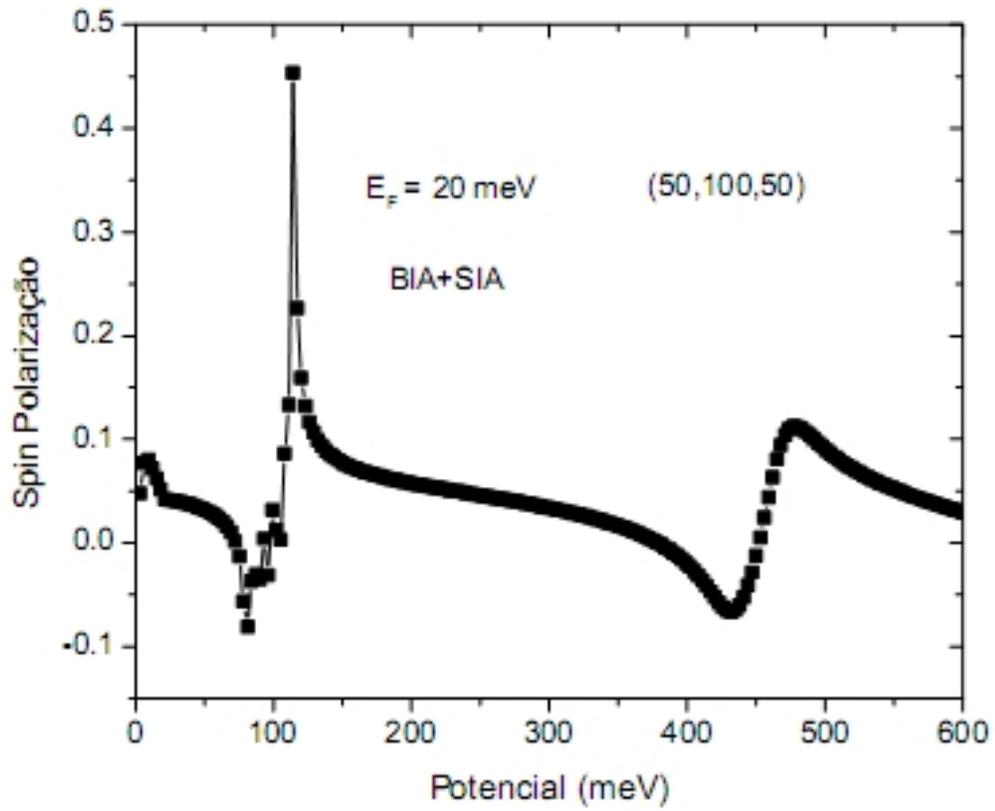


Figura 6.12: Spin Polarização de elétrons em dupla barreira ressonante de *InAs/GaSb* com larguras (50, 100, 50) Å para $E_F = 20 \text{ meV}$ com os efeitos BIA + SIA.

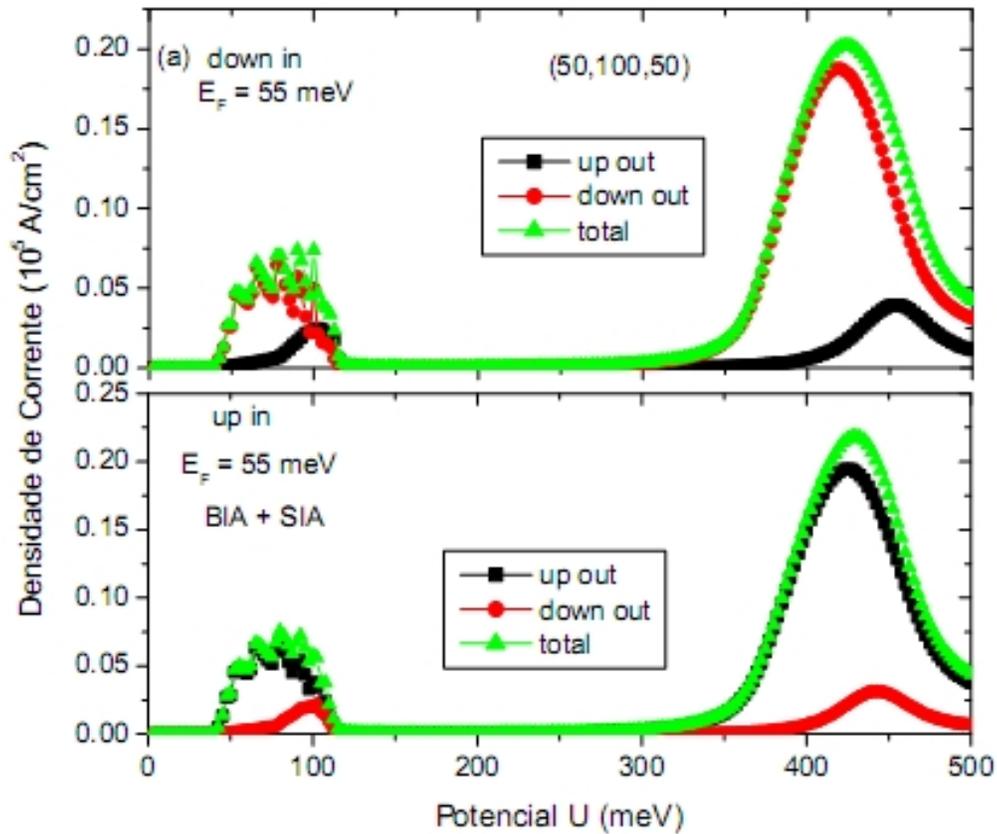


Figura 6.13: Densidade de Corrente de elétrons com spins polarizados em dupla barreira ressonante de $InAs/GaSb$ (50, 100, 50) Å para $E_F = 55\text{meV}$ com o termo BIA + SIA na parte (a) para *spin up* incidente e na parte (b) para *spin down* incidente.

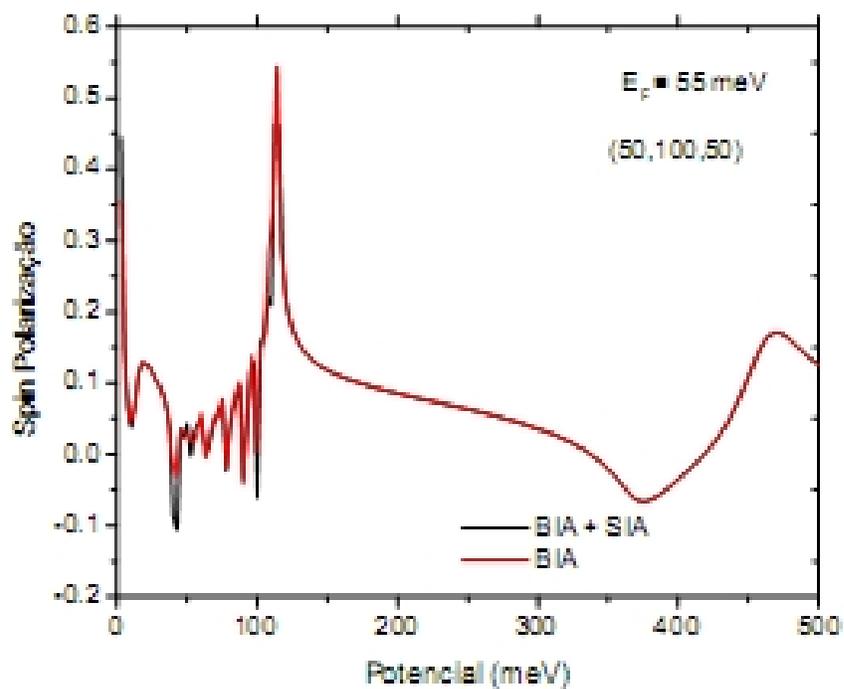


Figura 6.14: Spin Polarização de elétrons em dupla barreira ressonante de *InAs/GaSb* com larguras $(50, 100, 50)$ Å para $E_F = 55 \text{ meV}$ com os efeitos BIA + SIA.

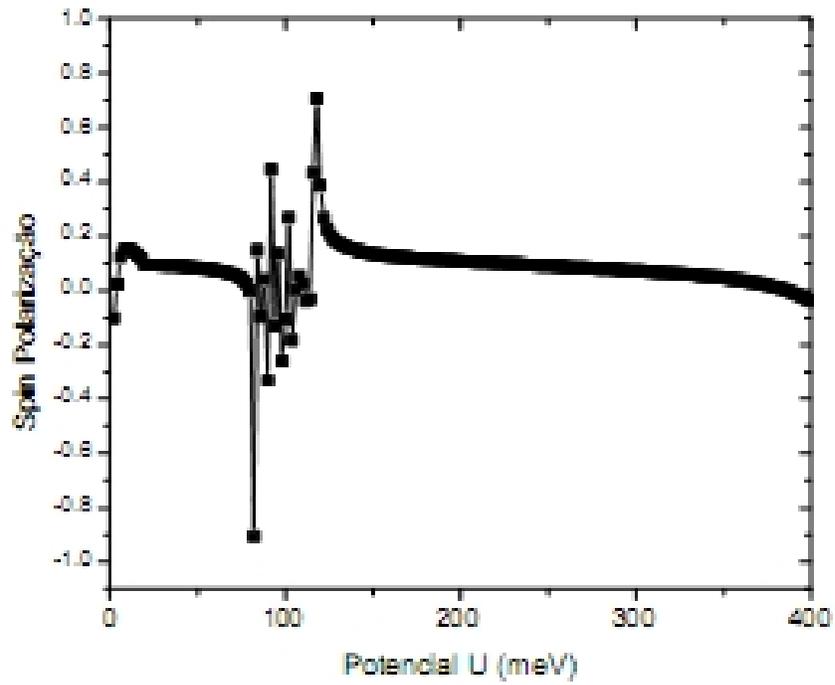


Figura 6.15: Spin Polarização de elétrons em dupla barreira ressonante de *InAs/GaSb* com larguras $(100, 100, 100) \text{ \AA}$ para $E_F = 20 \text{ meV}$ com termo completo da interação spin órbital.

Capítulo 7

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho apresentamos o transporte de spins polarizados através de heteroestruturas em dupla barreiras semicondutoras simétricas, utilizando a técnica da matriz de espalhamento na aproximação de massa efetiva do modelo de Rashba-Dresselhaus.

Um dos primeiros trabalhos teóricos a tratar o problema de tunelamento de spins polarizados em dupla barreira, na aproximação de massa efetiva foi feito por K. Gnanasekar e K. Navaneethakrishnan [14] usando um modelo que incluía os efeitos combinados das interações spin órbita de Rashba e **do termo linear de Dresselhaus**. No modelo proposto, o tunelamento dependente de spin, através da dupla barreira é descrito ao se diagonalizar o Hamiltoniano combinado de Dresselhaus (termo linear) e Rashba para $\varphi = \frac{\pi}{4}$, desacoplando os estados de *spin* com orientações *up* (+) e *down* (-). Usando esse modelo e com essas aproximações, os autores encontram uma eficiência de polarização entre 75 – 85%.

Levados pelo questionamento do porque dos trabalhos publicados, até o momento, em geral tratarem da contribuição de Dresselhaus apenas da forma truncada e sabendo da versatilidade da técnica da matriz de espalhamento, que permite a incorporação de diferentes tipos de interações, propusemos neste trabalho estudar os efeitos de interação spin órbita no transporte de elétrons em sistemas de duplas barreiras de *InAs/GaSb* usando um modelo de interação spin órbita contendo duas contribuições: o termo de Dresselhaus

(BIA), em sua forma quase completa (até a terceira ordem em k_{\parallel}), e a interação spin órbita de Rashba.

Uma das aproximações que permitem facilitar o cálculo da transmissividade em heteroestruturas é chamada de Aproximação de Massa Efetiva. Nessa aproximação, do problema original, de uma partícula sujeita ao potencial cristalino interno e um potencial externo, o transformamos em um problema de uma partícula livre sujeita apenas ao potencial externo. Todos os efeitos do potencial interno é então embutido na massa da partícula, que passa a se comportar como se, de fato, tivesse uma massa "efetiva", diferente daquela original. De forma simplificada, as funções de onda que descrevem essa partícula nessa aproximação, são chamadas de Funções Envelopes. É fundamental conhecermos o comportamento das partículas no cristal perfeito, através das funções envelopes $\mathbf{F}_{\uparrow}(k_{\parallel}, k_{z\uparrow}, \varphi)$, $\mathbf{F}_{\downarrow}(k_{\parallel}, k_{z\downarrow}, \varphi)$ e das auto energias $E^{\pm}(k_{\parallel}, k_{z\downarrow}, \varphi)$ para os estados *spin-up* e *spin-down*. O modelo de Massa Efetiva foi apresentado no capítulo II, enquanto que o cálculo da transmissividade foi apresentado no capítulo IV. No terceiro capítulo apresentamos os modelos de Rashba e Dresselhaus.

Na técnica da matriz de espalhamento, os vetores de onda k_z são importantes na construção da função de onda total em cada região da heteroestrutura, que como vimos, é obtida da combinação linear das soluções no *bulk*. Para isso, no Capítulo IV desenvolvemos uma análise bem elaborada desses vetores, objetivando a construção das funções envelopes na heteroestrutura. Como resultado geral dessa análise, observa-se que a natureza das soluções de k_z para os estados de *spin up* e *spin down* dependem fortemente da magnitude das quantidades k_x , k_y e da energia E . Como vimos naquele capítulo, existem duas energias críticas, denominadas E_{c3} , e E_{c4} , que dividem o espectro de energia em duas regiões, das quais dependem a natureza de k_z .

Uma vez obtida as funções envelopes no cristal perfeito, usamos a combinação linear dessas funções e as condições de contorno apropriadas em cada interface (sendo elas a conservação da densidade de probabilidade e da densidade de corrente de probabilidade) para a obtenção da matriz de espalhamento. Tal técnica é apresentada no Capítulo

IV, para o modelo de uma banda e extrapolada para um modelo de múltiplas bandas. Vale lembrar que nesses cálculos usamos a aproximação já tradicional na teoria de massa efetiva de que as funções de Bloch são iguais nos dois materiais que formam a interface. Desta maneira, calcula-se a transmissividade como a razão entre as correntes de probabilidade na região do coletor e do emissor. A expressão analítica para tais correntes, dentro da aproximação de massa efetiva foi introduzida formalmente no Capítulo IV. No Capítulo V, apresentamos e discutimos os resultados para a transmissividade.

Para os sistemas considerados, temos dois (em alguns casos, apenas um) níveis na região do poço que se quebra em dois devido a interação spin órbita. Com exceção das direções ($\pm 45^0$) para cada incidência (*up* ou *down*) na região do emissor, temos dois canais de saída *up* ou *down*, na região do coletor, e, os picos nas curvas de transmissividades correspondem aos estados ressonantes $E_{\uparrow 1}$ (*up*) e $E_{\downarrow 1}$ (*down*) que são separados quando incluímos a interação spin órbita (*spin-splitting*). Assim o pico de transmissividade do estado *up* tem intensidade maior para incidência *up* e o pico do estado *down* tem intensidade maior para incidência *down*. Para as direções ($\pm 45^0$) a mistura entre as bandas de condução *up* e *down* é baixa no emissor e coletor e temos dois canais de saída praticamente independentes; dessa forma para incidência *spin up* só temos transmissividade *up* e incidência *down* só temos transmissividade *down* com ressonância nos seus respectivos estados ressonantes.

Para a análise do comportamento da transmissividade em função do momento paralelo com somente termo de Dresselhaus, Rashba e o combinado Rashba + Dresselhaus, escolhemos um ângulo de 30^0 (ângulo genérico) e observamos nas curvas de transmissividade uma separação maior dos níveis ressonantes (*splitting*) à medida que o momento paralelo aumenta para as três situações, além de um deslocamento dos picos em direção à maior energia. Essa separação varia linearmente com k_{\parallel} numa contribuição que vem dos termos lineares de Dresselhaus e Rashba. Uma maior contribuição para o *spin splitting* vinda do efeito combinado Rashba (SIA) + Dresselhaus acontece quando o *mixing* é máximo na região do poço $\varphi = -225^0, -45^0, 135^0, 315^0$.

Como análise geral, observamos ainda que à medida que k_{\parallel} paralelo aumenta, as curvas de transmissividade de saída *up* e *down* ficam mais próximas, isso é refletido na polarização que é maior para menor valor de k_{\parallel} . Entretanto à medida em que o momento paralelo k_{\parallel} cresce, a eficiência de polarização em função da energia mantém o mesmo comportamento, deslocando-se para a direção de maior energia ocorrendo uma diminuição da eficiência de polarização. Desse modo, podemos atribuir ao parâmetro k_{\parallel} , em especial sua componente paralela, uma forma de controlar a eficiência de polarização.

Os resultados para as eficiências de polarização para alguns valores de campo elétrico aplicado, mostram um deslocamento das curvas em direção à menores energias, con-dizente com o efeito do campo nos níveis ressonantes do poço, ao deslocá-los "para baixo" em energia. Como resultado geral o aumento do campo externo aumenta a mis-tura, diminuindo drasticamente a eficiência de polarização para um determinado ângulo φ , com exceção dos ângulos onde o *mixing* é mínimo no emissor, como por exemplo, 45° e 135° , onde encontramos uma eficiência de polarização de quase 100% para campos variando de 0 a $100kV/cm$. No caso de $\varphi = 135^{\circ}$, temos uma inversão no nível funda-mental, sendo o *spin up*, o de menor energia. Assim além do campo externo, a direção é importante para controlar a eficiência de polarização.

Para análise do efeito de Dresselhaus e Dresselhaus + Rashba na corrente de spins po-larizados e spin polarização em dupla barreira ressonante de *InAs/GaSb* para as larguras $(30, 60, 30)\text{Å}$, $(50, 100, 50)\text{Å}$. Escolhemos dimensões menores das barreiras e poço em re-lação as dimensões usadas na maioria dos cálculos para transmissividade para diminuir o esforço computacional.

Para o sistema $(30, 60, 30)$ tanto para o nível de dopagem, $E_F = 20meV$ como para $E_F = 55meV$, encontramos baixas spin polarização, uma característica de sistemas com largura baixa da barreira. Como resultado geral para o sistema $(30, 60, 30)$ com baixa dopagem a contribuição BIA + SIA em comparação com a contribuição SIA aumenta fracamente as correntes *up* e *down out* para incidência *spin up* e respectivamente, em compensação diminui as componentes *up out* e *down out* para as incidências *down* e

up respectivamente; as polarizações são bem parecidas com maiores intensidade na faixa de 4% \rightarrow 8%. Para $E_F = 55meV$ ocorre um aumento dos limites de integração em k_{\parallel} (aumento da mistura) provocando uma maior separação nos picos ressonantes *up* e *down* aumentando a spin polarização, 13% com somente a inclusão do termo BIA e 11% com os termos combinado BIA + SIA, que são polarizações relativamente baixas que podem ser aumentadas com o aumento da largura do poço ou da barreira. Desta forma, para o sistema (50, 100, 50) com nível de Fermi $E_F = 55meV$ encontramos para o primeiro nível uma polarização de 54% com somente termo BIA e 47% com o termo BIA + SIA para os elétrons *spin up*. Fica evidente, que o aumento da dopagem introduz um aumento no valor do momento paralelo, aumentando a contribuição dos termos BIA e SIA e da spin polarização.

Em linhas gerais, o modelo combinado Dresselhaus - Rashba usado nessa tese apesar de mais complexo, permite um controle maior nas propriedades eletrônicas através do momento paralelo às camadas, e do ângulo polar φ e da voltagem aplicada. Portanto, interações spin órbita de Dresselhaus e Rashba associadas são mecanismos importantes para controlar a eficiência de dispositivos *spintrônicos*. Nossos resultados mostram que as eficiências de polarização e a spin polarização são maiores quando somente o mecanismo de Dresselhaus (BIA) e menores com os mecanismos BIA + SIA.

Como trabalhos futuros, pretendemos aplicar o formalismo aqui desenvolvido para estudo das propriedades de transporte em heteroestruturas não magnéticas e estender o cálculo para barreira tripla.

REFERÊNCIAS

- [1] B. Das, S. Datta, and R. Reifenberg, *Phys. Rev. B* **41**, 8278 (1990).
- [2] Johnson M and Silsbee R H 1985 *Phys. Rev. Lett.* **55** 1790
- [3] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, et J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472, (1988).
- [4] F. Saurenbach, U. Walz, L. Hinchey, P. Grünberg, and W. Zinn *J. Appl. Phys.* **63**, 3473 (1988).
- [5] R. Meservey, P. M. Tedrow and Peter Fulde, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1270 (1970).
- [6] M. Julliere, *Phys. Lett. A* **54**, 225 (1975).
- [7] E.I. Rashba, *Phys. Rev. B* **62**, R16267 (2000).
- [8] David K. Ferry, *Quantum Mechanics* (IOP Publishing, Philadelphia, 1995).
- [9] L. Esaki and R. Tsu, IBM, *J. Res. Dev.* **14**, 61 (1970).
- [10] E.A. de Andrada e Silva, G.C. La Rocca, F. Bassani, *Phys. Rev. B* **50**, 8523 (1994).
- [11] E.A. de Andrada e Silva, G.C. La Rocca, F. Bassani, *Phys. Rev. B* **55**, 16293 (1997).
- [12] John Schliermann, J. Carlos Egues and Daniel Loss, *Phys. Rev. Lett.*
- [13] V. I. Perel, S. A. Tarasenko and I. N. Yassievich, *Phys. Rev. B* **67**, 201304(R) (2003).

- [14] K. Gnanasekar and K. Navaneethakrishnan, *Physica E* **28**, 328-332 (2005).
- [15] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- [16] Y. A. Bychkov et. al., *J. Phys. C* **17**, 6039 (1984).
- [17] G.E. Marques, A.C.R. Bittencourt, C.F. Destefani, and Sergio E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **72**, 045313 (2005).
- [18] J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**,
- [19] S. Kivelson and C. D. Gelatt, *Phys. Rev. B* **20**, 4167 - 4170 (1979).
- [20] M. Cahay, M. McLennan, S. Datta, *Phys. Rev. B* **17**, 10125 (1988).
- [21] A. Voskoboynikov, S.S. Liu, C.P. Lee, *Phys. Rev. B* **59**, 12514 (1999).
- [22] E.A. de Andrada e Silva , G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **59**, 15583,(1999).
- [23] A. Voskoboynikov, S.S. Liu, C.P. Lee, O. Tretyak, *J. Appl. Phys.* **87**, 387 (2000).
- [24] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt, Rinehart and Winston,1976).
- [25] P. Löwdin, *J. Chem. Phys.* **19**, 1396 (1951).
- [26] J. Bardeen, *J. Phys. Chem. Solids*, **6**, 367-371 (1938).
- [27] A. C. R. Bittencourt. "Tunelamento Ressonante de Buracos em Heteroestruturas Semicondutoras com Camadas Tensionadas". Tese de Mestrado - 1996.
- [28] E.O. Kane, *Tunneling Phenomenon in Solids*, Plenum, New York, 1969.
- [29] N. W. Aschroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics1* (Holt, Rinehart and Winston, 1976) p. 176; Methods of Band Calculations Applicable to III-V Compounds. R. K. Williardson e A.C. Beer, editores, Physics of III-V Compounds, vol.1 de *Semiconductors and Semimetals*. páginas 21-24, New York, (1966). Academic Press.

- [30] B. K. Ridley, *Quantum Processes in Semiconductors*, Clarendon Press, Oxford, (1982).
- [31] J. F. Walker, "Semiconductor Growth Techniques ", J. R. Leite, A. Fazzio, A. S. Chaves, editores, Proceedings of the 5th Brazilian School on Semiconductor Physics, página 22, Singapore, (1992), World Scientific.
- [32] S. R. White, L. J. Sham, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 879-882, (1981).
- [33] R. Wessel and M. Altarelli, *Phys. Rev. B* **39**, 12 802 (1982).
- [34] Calvin Y.-P. Chao and S.L. Chuang, *Phys. Rev. B* **43**, 7 027 (1990).
- [35] A C. Bittencourt, A. M. Cohen, G. E. Marques, *Phys. Rev. B* **57**, 4525 (1998).
- [36] M. H. Weiler, "*Semiconductors and Semimetals*", R. K. Williarddson and A.C. Beer, eds. (Academic Press, New York, 1981) vol.**16**, p.119.
- [37] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi and T. Enoki, *Phys. Rev. Lett.* **78** (7), 1335-1338 (1997) G. Y. Wu, K.-M. Hung, and C.-J. Chen, *Phys. Rev. B* **46**, 1521 (1992).
- [38] S. J. Papadakis, E. P. de Poortere, H. C. Manoharan, M. Shayegan, R. winkler: *Science* **283**, 2056 (1999).
- [39] Y.A. Bichkov, E. I. Rashba, *J. Phys.C: Solid State Phys.* **17**, 6039-6045 (1984).
- [40] Y.A. Bichkov, E. I. Rashba, *JETP Lett* **39** (2), 78-81 (1984).
- [41] M. Cahay, M. mclennan, S. Datta, *Phys. Rev. B* **17**, 10125 (1988).
- [42] G. Lommer, F. Malcher, U. Rössler, B. E. Kane, *Phys. Rev. B* **32**, 6965 (1985).
- [43] U. Rössler, F. Malcher, G. Lommer: "*spin splitting in structured semiconductors*" in *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II* ed. by G. Landwehr (Springer, Berlin, Heidelberg, 1989), vol, **87** of Solid State Sciences, p.376.
- [44] R. Wollrab *et. al.*, *Semicond. Sci. Technol.* **4** , 491 (1989).

- [45] J. Luo *et. al.*, *Phys. Rev. B* **41**, 7685 (1990).
- [46] J. Nitta *et. al.*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1335 (1997).
- [47] J. P. Heida *et. al.*, *Phys. Rev. B* **57**, 11911 (1998).