



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

Jhon Elber Leon Padilla

ANISOTROPIA GIROMAGNÉTICA PARA ELÉTRONS EM POÇOS QUÂNTICOS ACOPLADOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, orientada pelo Prof. Dr. Antonio Ferreira da Silva e coorientada pelo Dr. Marcelo Alejandro Toloza Sandoval, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

Salvador
2015



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

Jhon Elber Leon Padilla

ANISOTROPIA GIROMAGNÉTICA PARA ELÉTRONS EM POÇOS QUÂNTICOS ACOPLADOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, orientada pelo Prof. Dr. Antonio Ferreira da Silva e coorientada pelo Dr. Marcelo Alejandro Toloza Sandoval, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

Salvador
2015

Leon Padilla. Jhon Elber
ANISOTROPIA GIROMAGNÉTICA PARA ELÉ-
TRONS EM POÇOS QUÂNTICOS ACOPLADOS/
Salvador: Universidade Federal da Bahia, 2015. 82p.;

1. Efeito Zeeman; 2. Fator g de Spin; 3. Interação Spin-Órbita; 4. Múltiplos Poços Quânticos; 5. Spintrônica.

AGRADECIMENTOS

Imprescindíveis para conclusão deste trabalho, ao Prof. Dr. Antonio Ferreira da Silva e ao Dr. Marcelo Alejandro Toloza Sandoval deixo registrada minha inestimável gratidão. Meus agradecimentos ao Prof. Dr. Erasmo Assumpção de Andrada e Silva, pelas discussões de grande valor científico que ocorreram durante minha visita ao Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (em São José dos Campos, São Paulo). Meus sinceros agradecimentos aos meus amigos da Colômbia: Mozo, Laura Lara, Leonardo Fabio, Jairo, Daniel, Oscar, Alfredo e Francisco; aos meus amigos peruanos Adin e Daniel e ao meu amigo venezuelano Jose Alejandro. Aos amigos de turma: Rone, Mariana, Cirlei, Cleudson e José Luís, e às amigas Luciana e Débora - minhas primeiras amigas em Salvador. Aos meus pais, minha irmã e sobrinha, agradeço pelo apoio, motivação e incentivo. Aos professores do Laboratório de Propriedades Ópticas e aos professores do Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, serei sempre muito grato! Pelo suporte financeiro que me foi concedido em função da realização deste trabalho, agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

RESUMO

Este trabalho está situado na área de spictrônica a qual é baseada no grau de liberdade do spin do elétron, o desdobramento Zeeman é caracterizado por o fator g de landé que pode diferir fortemente do fator- g de spin para um elétron no vácuo $g_0 = 2$. O objetivo deste trabalho é investigar a anisotropia do fator g do elétron em poços quânticos duplos (DQWs), que é consequência do confinamento quântico, devido à diferença entre o campo magnético transversal (campo magnético no plano da amostra) e longitudinal (campo magnético paralelo ao eixo de crescimento) dos fatores g $\Delta g = g_{\perp} - g_{\parallel}$.

Hamiltoniano efetivo para os estados eletrônicos do poço quântico duplo DQWs na presença de um campo magnético externo é derivado dentro da aproximação de função envelope, baseada no modelo de Kane múltiplas bandas. O fator g efetivo do elétron é então resolvido analiticamente. Esta pesquisa permitiu a determinação do fator landé g , em função da largura da barreira central e da largura dos poços. Resultados Específicos para InAs /GaSb e $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ DQWs são apresentados e discutidos com os dados experimentais disponíveis

ABSTRACT

This work is within the area of Spintronics which is based on the electron's spin degree of freedom, the strength of the Zeeman splitting is characterized by the effective Landé factor g that can strongly differ from the free-electron g factor $g_0 = 2$. The aim of this work is, to investigate the anisotropy of the electron g -factor in double quantum well (DQWs), which is consequence of the quantum confinement, is obtained due to the difference between the transverse (magnetic field in the sample plane) and longitudinal (magnetic field parallel to the growth axis) g factors $\Delta g = g_{\perp} - g_{\parallel}$.

Effective Hamiltonian for the double quantum well (DQWs) electron states in the presence of an external magnetic field is derived within the envelope-function approximation, based on the multiband kp Kane's model. the electron effective g factor It is then solved analytically

this research allowed the determination of the Landé g -factor, as a function of the central barrier width and the width of the wells. Specific results for narrow-gap InAs/ GaSb and $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ DQWs are presented and discussed with the available experimental data

SUMÁRIO

Pág.

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

1 INTRODUÇÃO	19
1.1 Poços quânticos semicondutores	22
1.2 Estruturas de múltiplos poços quânticos	26
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	33
2.1 Aspectos básicos e aproximações	33
2.2 Teoria de massa efetiva $k.p$	35
2.2.1 Modelo de Kane	38
2.2.2 Interação spin-órbita	41
2.3 Aproximação de função envelope	48
2.3.1 Efeito do campo magnético	51
2.3.2 Níveis de Landau	52
2.3.3 Hamiltoniano de massa efetiva	55
3 RESULTADOS	59
4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	67
5 APÊNDICE	69
5.1 APÊNDICE A	69
5.2 APÊNDICE B	70
5.3 APÊNDICE C	75
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	77

LISTA DE FIGURAS

	<u>Pág.</u>	
1.1	<p>FONTE (SANDOVAL et al., 2012). Ilustração da geometria de um poço quântico e as duas configurações consideradas para o campo magnético externos aplicado. (a) Mostra o perfil da banda de condução na direção de crescimento. Neste caso, o campo magnético externo é aplicado em uma direção paralela à interface entre os materiais. Em uma análise semiclássica, a órbita ciclotrônica mostrada na figura descreve a trajetória dos elétrons através das interfaces do poço. (b) Já no caso em que o campo magnético é aplicado na direção perpendicular à interface, os elétrons percorrem órbitas sobre uma região espacialmente homogênea (sem interfaces). Assim, haverá uma diferença entre os valores obtidos para o fator g efetivo quando consideramos as diferentes configurações mostradas acima (ou seja, para os casos (a) e (b)), essa diferença é que permite definir a anisotropia do fator g efetivo para elétrons confinados em heteroestruturas semicondutores.</p>	21
1.2	<p>Diagrama esquemático para as bandas de condução e valência em um poço quântico do tipo AlGaAs/GaAs/AlGaAs.</p>	23
1.3	<p>Função de onda e o autovalor de energia para o estado fundamental em um poço quântico quadrado finito e simétrico.</p>	25
1.4	<p>Ilustração de super-rede que intercala os materiais indicados por A e B.</p>	26
1.5	<p>Limites inferiores ($k = 0$) e superiores ($k = \pi$) das minibandas de energia para super-redes distintas (indicadas na figura) com período $L=a+b$. Para efeito de comparação, também mostramos a energia para o estado fundamental dos poços quânticos correspondentes, ou seja, $Al_{0.4}Ga_{0.6}As/GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As$ e $GaSb/InAs/GaSb$, e sua variação com a largura do poço.</p>	27
1.6	<p>Ilustração do potencial das bandas de valência e condução para um poço quântico duplo com poços de largura a e barreira central de largura b.</p>	28
1.7	<p>Níveis de energia para estados com paridade ímpar (-) e par (+) para os poços quânticos duplos simétricos indicados na figura e sua variação em função da largura da barreira central b.</p>	29
2.1	<p>Massa efetiva na banda condução para o modelo k.p, a linha reta é uma boa aproximação</p>	37
2.2	<p>Estrutura de bandas para o modelo de Kane de três bandas (SANDOVAL, 2014).</p>	40
2.3	<p>representação pictórica para o desdobramento da energia para o nível $l=1$</p>	42
2.4	<p>Número atômico promécio vs <i>spin orbit splitting</i>.</p>	42

2.5	Bandas de energia consideradas no modelo de Kane 8x8	46
2.6	representação esquemática da função de onda envelope, a figura de embaixo representa o potencial periódico, e a parte da acima mostra a variação lenta da função envelope modulada por rápida oscilação na rede da função de onda Bloch (WINKLER, 2003)	50
2.7	Esquema ilustrativo dos níveis de landau	53
2.8	Esquema ilustrativo de um poço quântico duplo finito com campo magnético aplicado perpendicular a direção de crescimento z.	55
2.9	Esquema ilustrativo de um poço quântico duplo finito com campo magnético aplicado paralelo a direção de crescimento z.	58
3.1	Os níveis de energia para $k = 0$ e para $k = \pi$ definem, respectivamente, os limites inferior e superior da primeira minibanda que caracteriza a super-rede. As curvas contínuas mostram os resultados obtidos com o modelo de Kane de oito bandas com os parâmetros $m^* = 0.023$, $E_g = 0.418$ eV, $\Delta = 0.38$ eV e $\delta g_{rem} = -0.5$ para o InAs e $m^* = 0.041$, $E_g = 0.81$ eV, $\Delta = 0.76$ eV e $\delta g_{rem} = -2.2$ para o GaSb. e as tracejadas o limite de banda única.	59
3.2	Energia dos níveis eletrônicos, para os estados simétrico e anti-simétrico, em função da largura da barreira central, com largura poço $a=40\text{\AA}$ para um poço quântico duplo simétrico $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$, $m_w^* = 0.067m_e$, $E_g^w = 1.52$ eV, $\Delta^w = 0.34$ eV, $\delta g_{rem}^w = -0.50$, $E_g^b = 1.94$ eV, $\Delta^b = 0.32$ eV, $\delta g_{rem}^b = 0.13$ e $v_0 = 0.277$ eV.	60
3.3	Energia dos níveis eletrônicos, para os estados simétrico e anti-simétrico, em função da largura da barreira central para um poço quântico duplo simétrico (com poços de InAs de largura $a=40\text{\AA}$ e barreiras de GaSb), $m^* = 0.023$, $E_g = 0.418$ eV, $\Delta = 0.38$ eV e $\delta g_{rem} = -0.5$ para o InAs e $m^* = 0.041$, $E_g = 0.81$ eV, $\Delta = 0.76$ eV e $\delta g_{rem} = -2.2$ para o GaSb	60
3.4	Energia dos níveis eletrônicos, para os estados simétrico e anti-simétrico, em função da largura da barreira central, com largura poço $a=60\text{\AA}$ para um poço quântico duplo simétrico $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$, $m_w^* = 0.067m_e$, $E_g^w = 1.52$ eV, $\Delta^w = 0.34$ eV, $\delta g_{rem}^w = -0.50$, $E_g^b = 1.94$ eV, $\Delta^b = 0.32$ eV, $\delta g_{rem}^b = 0.13$ e $v_0 = 0.277$ eV.	61
3.5	Energia dos níveis eletrônicos, para os estados simétrico e anti-simétrico, em função da largura da barreira central para um poço quântico duplo simétrico (com poços de InAs de largura $a=60\text{\AA}$ e barreiras de GaSb), $m^* = 0.023$, $E_g = 0.418$ eV, $\Delta = 0.38$ eV e $\delta g_{rem} = -0.5$ para o InAs e $m^* = 0.041$, $E_g = 0.81$ eV, $\Delta = 0.76$ eV e $\delta g_{rem} = -2.2$ para o GaSb.	61

3.6	evolução da função de onda do nível base simétrico com diferentes largura de barreira central, para um poço quântico duplo simétrico com poços de largura $a=2$ nm e barreiras barreiras de Al_{0.3}Ga_{0.7}As , $m_w^* = 0.067m_e$, $E_g^w = 1.52$ eV, $\Delta^w = 0.34$ eV, $\delta g_{rem}^w = -0.50$, $E_g^b = 1.94$ eV, $\Delta^b = 0.32$ eV, $\delta g_{rem}^b = 0.13$ e $v_0 = 0.277$ eV.	63
3.7	função envelope do estado base do DQW, para três diferentes larguras de barrerira central $b=0$ nm, $b=2$ nm, $b=4$ nm com poços de GaAs de largura $a=4$ nm e barreiras de Al_{0.3}Ga_{0.7}As , $m_w^* = 0.067m_e$, $E_g^w = 1.52$ eV, $\Delta^w = 0.34$ eV, $\delta g_{rem}^w = -0.50$, $E_g^b = 1.94$ eV, $\Delta^b = 0.32$ eV, $\delta g_{rem}^b = 0.13$ e $v_0 = 0.277$ eV.	63
3.8	Anisotropia para diferentes pequenas larguras da barreira central, em função da largura do poço para InAs/GaSb.	64
3.9	Anisotropia para diferentes larguras da barreira central, em função da largura do poço para InAs/GaSb.	64
3.10	Anisotropia para diferentes larguras da barreira central, em função da largura do poço, para seguintes parâmetros: $m_w^* = 0.067m_e$, $E_g^w = 1.52$ eV, $\Delta^w = 0.34$ eV, $\delta g_{rem}^w = -0.50$, $E_g^b = 1.94$ eV, $\Delta^b = 0.32$ eV, $\delta g_{rem}^b = 0.13$ e $v_0 = 0.277$ eV, o painel menor mostra anisotropia para poço quântico de largura a Obtida no modelo teórico obtido por (SANDOVAL et al., 2013) comparado com os dados experimentais (JEUNE et al., 1997)(símbolos em vermelho) e ((MALINOWSKI; HARLEY, 2000)) símbolos em preto.	65
5.1	Orbitais p, s de sistemas atômicos. O orbital s é esférico e, portanto, tem simétrica ao longo de todos os eixos; os orbitais p são antissimétricos ao longo da direção que são orientados	70

LISTA DE TABELAS

	<u>Pág.</u>
2.1 Valores da massa efetiva para $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ para diferentes semicondutores (YU; CARDONA, 1996)	37
2.2 Representação matricial $H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}^{8\times 8}$ obtida na base $\{ n, \sigma_y\rangle\}$	47
5.1 base diagonal $H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}^{8\times 8}$	71
5.2 base diagonal para $H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}^{8\times 8}$ (BASTARD, 1988)	72
5.3 Representação matricial $H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}^{8\times 8}$ obtida na base $\{ \bar{u}_i, \sigma_z\rangle\}$	73
5.4 base diagonal para $H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}^{8\times 8}$ (SILVA, 1992)	74

1 INTRODUÇÃO

No ano de 1970, Esaki e Tsu desenvolveram estudos pioneiros no âmbito das chamadas super-redes cristalinas formadas por monocamadas intercaladas, compostas por ligas semicondutoras distintas. Nas últimas décadas, com o advento dos sistemas de baixa dimensionalidade, houve um grande avanço na física dos semicondutores, onde entre os sistemas mais estudados estão as heteroestruturas dos grupos III-V, em particular, as heteroestruturas compostas pelas ligas GaAs e AlGaAs.

Existem diferentes técnicas de produção de heteroestruturas, uma das mais conhecidas é a epitaxia por feixe molecular (MBE). Esta técnica permite um crescimento controlado do material, intercalando monocamadas cujas espessuras são controladas em uma determinada direção, conhecida como direção de crescimento. Utilizando materiais que apresentam pequena diferenças parâmetro de rede, é possível produzir heterointerfaces desprovidas stress mecânico ou quase ideais. No caso da liga (GaAs), a substituição de uma parcela de átomos de gálio (Ga) por átomos de alumínio (Al) ocasiona o alargamento do *gap* de energia, possibilitando a produção de heteroestruturas formadas por heterointerfaces do tipo $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, onde as camadas de GaAs constituem os poços quânticos e as camadas de AlGaAs as barreiras. A espessura de cada barreira depende do número de monocamadas depositadas durante o processo de crescimento.

A produção de heteroestruturas utilizando materiais magnéticos culminou com o desenvolvimento da spintrônica, fortemente influenciada pela descoberta da magnetorresistência gigante (GMR) (BAIBICH et al., 1988). Uma potencial contribuição da spintrônica, esperada para um futuro próximo, são os benefícios em setores críticos da tecnologia da informação, tais contribuições, na entanto, estão atreladas à compreensão aspectos básicos da mecânica quântica e, em particular, do papel do spin dos portadores na condução de corrente elétrica em sólidos, a manipulação das propriedades que dependem do grau de liberdade de spin abre espaço para uma nova classe de dispositivos com maior capacidade de armazenamento flexibilidade, como, por exemplo, as memórias magnéticas não-voláteis (TEHRANI et al., 1999), além dos transistores de spin (DATTA, 1989; TING; CARTOIXA, 2002; SCHLIEMANN et al., 2003; LUSAKOWSKI et al., 2003) entre outros dispositivos (ZUTIC et al., 2004; FERT, 2008).

Dentre as contribuições da física para o desenvolvimento tecnológico, um dos exemplos mais emblemáticos foi a descoberta do transistor nos laboratórios da Bell em 1947, que rapidamente revolucionou a indústria da eletrônica, sucedida pela descoberta do transistor de silício (Si) em 1954. Ainda hoje, a eletrônica se estabelece a partir de dispositivos e circuitos que controlam corrente elétrica. Alguns passos a frente, a spintrônica oferece

uma nova forma de conceber e aplicar os dispositivos, com o processo de miniaturização dos dispositivos semicondutores integrados em larga escala nos *chips*, estes aproxima-se rapidamente do domínio da mecânica quântica, com efeitos que afetam o comportamento dos portadores em circuitos quasi-nanoestruturados. As partículas elementares apresentam uma propriedade puramente quânticas: o momento de dipolo magnético intrínseco conhecido como spin. A possibilidade de manipulação do spin traz novas perspectivas em relação à melhoria dos componentes de aplicação tecnológica (WOLF et al., 2006). Nesse contexto, a spintrônica surge como um amálgama de diferentes áreas da física, em particular, da eletrônica, da fotônica e do magnetismo. Motivada por interesses tanto de física fundamental, física aplicada, o paradigma da spintrônica consiste em manipular o grau de liberdade de spin dos portadores de carga e viabilizar sua utilização em dispositivos. Quando comparados aos dispositivos atualmente utilizados, espera-se que estes novos componentes spintrônicos apresentem uma melhoria em relação à velocidade de processamento de dados e, ao mesmo tempo, reduzam o consumo e a dissipação de energia. Do ponto de vista da física mais fundamental, manipular o spin requer que ele seja distinguível, ou seja, para manipular o spin é necessário romper a chamada degenerescência de spin. Os estados permitidos para elétrons em sólidos cristalinos são duplamente degenerados, devido à presença simultânea das simetrias de inversão no tempo e de inversão no espaço. Assim, o problema pode ser abordado de duas maneiras distintas:

- Com a quebra da simetria de inversão temporal, por exemplo, pela influência de um campo magnético externo.
- Com a quebra da simetria de inversão espacial, por exemplo, devido à geometria do potencial de confinamento em heteroestruturas.

A quebra da degenerescência de spin promovida pela influência de um campo magnético externo é conhecida como efeito Zeeman anômalo, e a grandeza física que determina a separação dos níveis de energia, para estados eletrônicos, com spins opostos é chamada de fator g de spin. Para um elétron no vácuo, o fator g de spin possui um valor muito próximo de 2, por outro lado, para elétrons em um sólido cristalino, o fator g de spin é renormalizado pela interação do elétron com *bulk*, e pode variar drasticamente com o material, passando a ser conhecido como fator g efetivo.

Para elétrons em heteroestruturas semicondutoras, o fator g de spin é também renormalizado pelo potencial de confinamento onde, tanto trabalhos experimentais (III; FANG, 1987; SNELLING et al., 1991; HANNAK et al., 1995; ZHAO et al., 1996; SIRENKO et al., 1997; JEUNE et al., 1997; MALINOWSKI; HARLEY, 2000; ZHANG et al., 2004; TOMIMOTO et al., 2010) quanto teóricos (IVCHENKO; KISELEV, 1992; IVCHENKO et al., 1997; KISELEV et al., 1999; KOTLYAR

et al., 2001; DIOS-LEYVA et al., 2006; PFEFFER; ZAWADZKI, 2006; BRUNO-ALFONSO et al., 2010) contribuíram para a compreensão da relação entre os efeitos do confinamento e o valor associado do fator g . A dependência do fator g efetivo com a largura do poço quântico, assim como a influência dos materiais que o compõem, são algumas das questões exploradas nos trabalhos citados. Entretanto, a despeito dos avanços obtidos, sabe-se que o fator g efetivo também apresenta uma anisotropia em relação às direções preferenciais, que podem ser definidas em uma heteroestrutura, como mostra na figura. 1.1, além de isso, alguns aspectos dessa anisotropia ainda não foram completamente compreendidos.

Recentemente, a partir de uma reformulação da teoria de massa efetiva e da função envelope, foi desenvolvido um modelo que permite estudar o efeito de anisotropia do fator g efetivo em heteroestruturas semicondutoras (SANDOVAL et al., 2012; SANDOVAL, 2014).

Os estudos iniciais realizados a partir desse modelo ficaram reestrictos aos poços quânticos simples. Este trabalho, propõe a aplicação do modelo em questão em estruturas de múltiplos poços, onde, em especial, e introduzido o conceito de acoplamento entre poços quânticos e estudada a anisotropia do fator g efetivo em função desse acoplamento.

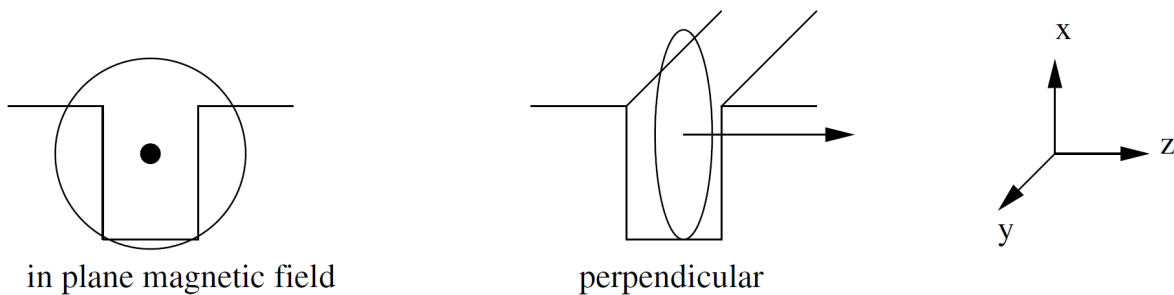


Figura 1.1 - FONTE (SANDOVAL et al., 2012). Ilustração da geometria de um poço quântico e as duas configurações consideradas para o campo magnético externos aplicado. (a) Mostra o perfil da banda de condução na direção de crescimento. Neste caso, o campo magnético externo é aplicado em uma direção paralela à interface entre os materiais. Em uma análise semiclassical, a órbita ciclotrônica mostrada na figura descreve a trajetória dos elétrons através das interfaces do poço. (b) Já no caso em que o campo magnético é aplicado na direção perpendicular à interface, os elétrons percorrem órbitas sobre uma região espacialmente homogênea (sem interfaces). Assim, haverá uma diferença entre os valores obtidos para o fator g efetivo quando consideramos as diferentes configurações mostradas acima (ou seja, para os casos (a) e (b)), essa diferença é que permite definir a anisotropia do fator g efetivo para elétrons confinados em heteroestruturas semicondutores.

1.1 Poços quânticos semicondutores

A engenharia dos semicondutores nanoestruturados fundamenta-se na possibilidade de um alinhamento controlado das bandas de energia desses materiais, motivo pelo qual é também conhecida como engenharia de bandas. O desenvolvimento desses materiais está incondicionalmente atrelado à ciência de crescimento de cristais, esta área tecnológica tem motivado o desenvolvimento várias técnicas de crescimento, tais como a epitaxia de fase líquida (LPE), a epitaxia por feixe molecular (MBE) (TSAO, 2012) e a epitaxia por fase de vapor metalorgânico (MOVPE) (STRINGFELLOW, 1999), também conhecida como deposição de vapor químico metalorgânico (DQVMO). A base do princípio de crescimento epitaxial consiste na condensação dos fluxos atômicos ou moleculares obtidos pela evaporação de fontes sólidas, sobre um substrato monocristalino. No caso da técnica conhecida como MBE, as principais vantagens são o alto grau de controle, das camadas crescidas, tanto na composição, quanto na dopagem das ligas semicondutoras. Além das baixas taxas de crescimento ($\sim 0.1 - 2.0 \left(\frac{\mu m}{min}\right)$), que permitem iniciar e interromper os feixes repentinamente a assim produzir interfaces abruptas entre os materiais. As técnicas MBE e MOVPE permitem o crescimento de estruturas contendo múltiplos poços quânticos separados por barreiras de potencial, onde o confinamento quântico restringe o movimento dos portadores em uma ou mais direções. Com os portadores confinados nessas estruturas, o efeito do confinamento torna-se particularmente importante quando a espessura das camadas (das barreiras e poços) é comparável ao comprimento de onda de de Broglie. Considerando uma partícula livre de massa m , a uma temperatura T o comprimento de onda será dado por

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{m k_B T}}, \quad (1.1)$$

onde $h \simeq 6,63 \times 10^{-34} Js$ é a constante de Planck e $k_B \simeq 1,38 \times 10^{-23} J/K$ é a constante de Boltzmann. Como exemplo, considerando a liga de $GaAs$, onde o elétron possui uma massa efetiva de $0.067m_0$ (m_0 é a massa do elétron no vácuo), temos $\lambda = 2nm$ para $T = 300K$. Isto significa que estruturas com espessura da ordem de $10nm$ seriam necessárias, a fim que o efeito do confinamento quântico sejam observados à temperatura ambiente. A figura. 1.2 ilustra o perfil das bandas de condução e valência para um poço quântico do tipo $AlGaAs/GaAs/AlGaAs$. Na banda de condução as interfaces podem ser vistas como barreiras de potencial que confinam o movimento dos elétrons na direção de crescimento.

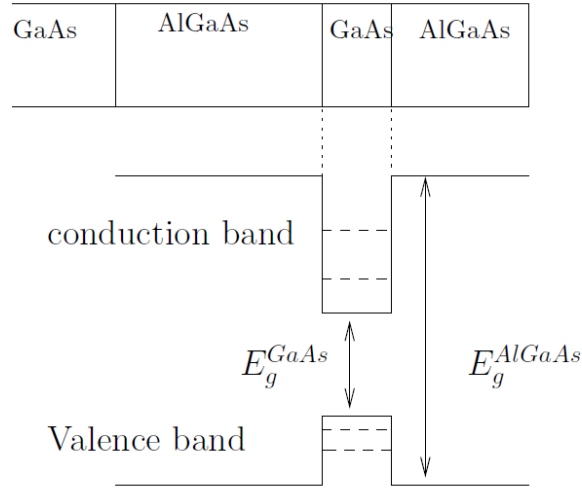


Figura 1.2 - Diagrama esquemático para as bandas de condução e valência em um poço quântico do tipo AlGaAs/GaAs/AlGaAs.

Para compreender o efeito de acoplamento entre os poços quânticos semicondutores e sua relação com a anisotropia a do fator g de spin é indispensável conhecer o formalismo básico. Naturalmente, se o interesse é estudar as propriedades das estruturas de múltiplos poços, este estudo por compreender o caso do poço quântico simples, encontrando a solução da equação de Schroedinger para as diferentes regiões, do poço e da barreira isto é:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_w^*} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad \text{para} \quad |z| > L/2, \quad (1.2)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m_b^*} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + V_0 = E\psi(\mathbf{r}) \quad \text{para} \quad |z| < L/2, \quad (1.3)$$

Em que m_w é massa efetiva para o material da região do poço, m_b é a massa efetiva para o material da barreira e V_0 é a altura da barreira de potencial. Esse problema pode ser separado em três problemas independentes, um problema para cada direção espacial. Como consequência, a função de onda pode ser escrita. Como $\Psi(\mathbf{r}) = \phi(x)\vartheta(y)\chi(z)$. Como resultado da invariância translacional nas direções x e y , temos $\phi(x) = e^{ik_x x}$ e $\vartheta(y) = e^{ik_y y}$. Então, a equação resultante na direção z será tal que

$$\frac{\hbar^2}{2m_b^*} \left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_{\parallel}^2 \right] \chi(z) = (E - V_0)\chi(z) \quad \text{para} \quad |z| > L/2, \quad (1.4)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_w^*} \left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_{\parallel}^2 \right] \chi(z) = E\chi(z) \quad \text{para} \quad |z| < L/2, \quad (1.5)$$

onde o vetor de onda paralelo à interface pode ser definido como $k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. olhando como atenção os estados ligados, isto é, estados cujas energias satisfaçam a seguinte relação: $V_0 > E > 0$. Sendo um dos problemas mais discutidos no contexto da mecânica quântica básica, a função de onda para o poço de potencial simétrico finito é bem conhecida e descreve uma onda no interior do poço, em que, evanesce exponencialmente nas regioas da barreira, ou seja,

$$\chi(z) = B \cdot \begin{cases} \sin(k_w z) \\ \cos(k_w z) \end{cases} \quad \text{para} \quad |z| < L/2, \quad (1.6)$$

e

$$\chi(z) = A e^{-k_b |z|} \quad \text{para} \quad |z| > L/2. \quad (1.7)$$

Os respectivos vetores de onda são tais que

$$k_b = \sqrt{\frac{2m_b^*(V_0 - E)}{\hbar^2} - k_{\parallel}^2} \quad e \quad k_w = \sqrt{\frac{2m_w^*E}{\hbar^2} - k_{\parallel}^2}. \quad (1.8)$$

A chamada condição de contorno de Ben-Daniel e Duke ([BENDANIEL; DUKE, 1966](#)) garante que o fluxo de densidade de probabilidade, através das interfaces seja contínuo:

$$\chi_w(z)|_{z_0} = \chi_b(z)|_{z_0}, \quad (1.9)$$

$$\frac{1}{m_w^*} \frac{d}{dz} \chi_w(z) \Big|_{z_0} = \frac{1}{m_b^*} \frac{d}{dz} \chi_b(z) \Big|_{z_0}. \quad (1.10)$$

Através de uma manipulação algébrica simples, são obtidas as respectivas equações transcendentais para as funções de onda com paridade par e ímpar:

$$- \tan(k_b L/2) = \frac{m_b^* k_w}{m_w^* k_b} \quad e \quad - \cot(k_b L/2) = \frac{m_b^* k_w}{m_w^* k_b}. \quad (1.11)$$

na figura [1.3](#) representa-se um diagrama esquemático da função de onda do poço quântico simples, as soluções das Equações. [1.11](#) são obtidas numericamente e denotadas por $E_n(k_{\parallel})$, a energia total para o sistema é tal que

$$E = E_n(k_{\parallel}) + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_b^*} \quad (1.12)$$

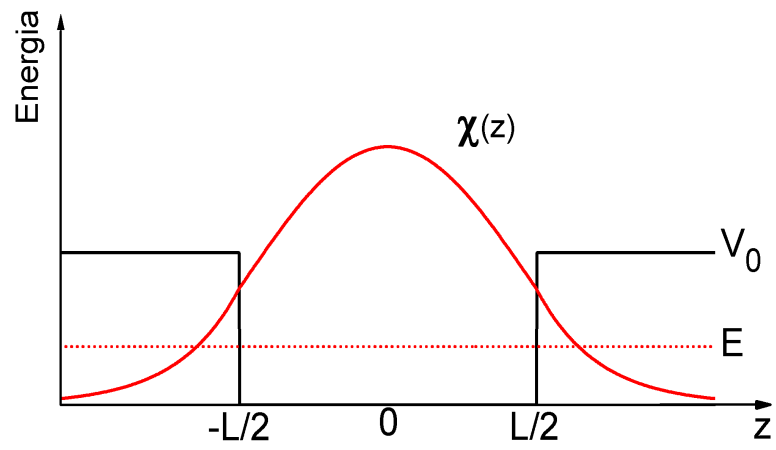


Figura 1.3 - Função de onda e o autovalor de energia para o estado fundamental em um poço quântico quadrado finito e simétrico.

1.2 Estruturas de múltiplos poços quânticos

Dentre os conceitos básicos sobre os quais se fundamenta a física do estado sólido, está o conceito de estrutura cristalina. Define-se uma estrutura cristalina como o produto resultante de um ordenamento espacial, perfeitamente periódico, de réplicas de uma estrutura elementar conhecida como célula unitária. Sob essa óptica, pode-se dizer que as super-redes são cristais artificiais com células unitárias definidas em uma mesoescala. Conforme discutido, através de sofisticadas técnicas de produção de nanoestruturas, é possível intercalar camadas muito finas, nanométricas, compostas por ligas semicondutoras distintas. É possível, por exemplo, intercalar camadas de GaAs com camadas de AlGaAs, onde as camadas de GaAs constituem regiões de poços quânticos e as camadas de AlGaAs constituem barreiras de potencial, como ilustrado na Fig. 1.4.

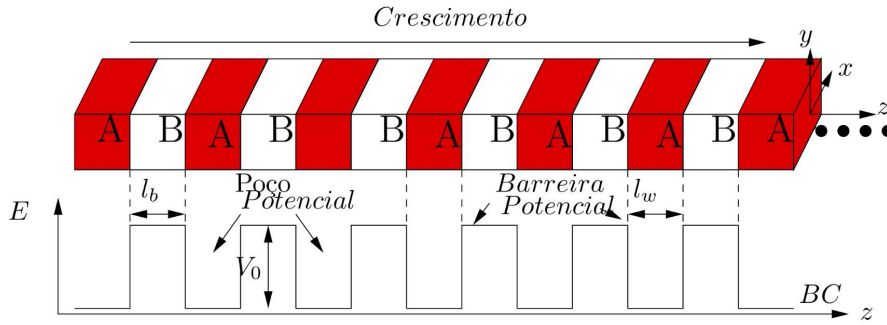


Figura 1.4 - Ilustração de super-rede que intercala os materiais indicados por A e B.

A estrutura eletrônica das super-redes é caracterizada pela formação de minibandas de energia e de forma análoga ao que ocorre nos sólidos cristalinos, essas minibandas são separadas por zonas proibidas aos elétrons. No caso de uma super-rede perfeita (super-rede infinita), as soluções (energias permitidas para os elétrons) são determinadas a partir da condição de periodicidade, que pode ser abordada por meio do modelo de Kronig-Penney. A figura. 1.5 mostra os limites inferior e superior da primeira minibanda, calculados para estados ligados ($E < V_0$) utilizando o modelo de Kronig-Penney, que dá lugar equação à transcendental:

$$\cos(kd) = \cos(k_w a) \cosh(K_b b) + \frac{1}{2} \left(\frac{m_w^* K_b}{m_b^* k_w} - \frac{m_b^* k_w}{m_w^* K_b} \right) \sin(k_w a) \sinh(K_b b) \quad (1.13)$$

onde

$$K_b = \sqrt{\frac{2m_B^*(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad e \quad k_w = \sqrt{\frac{2m_B^*(E)}{\hbar^2}}. \quad (1.14)$$

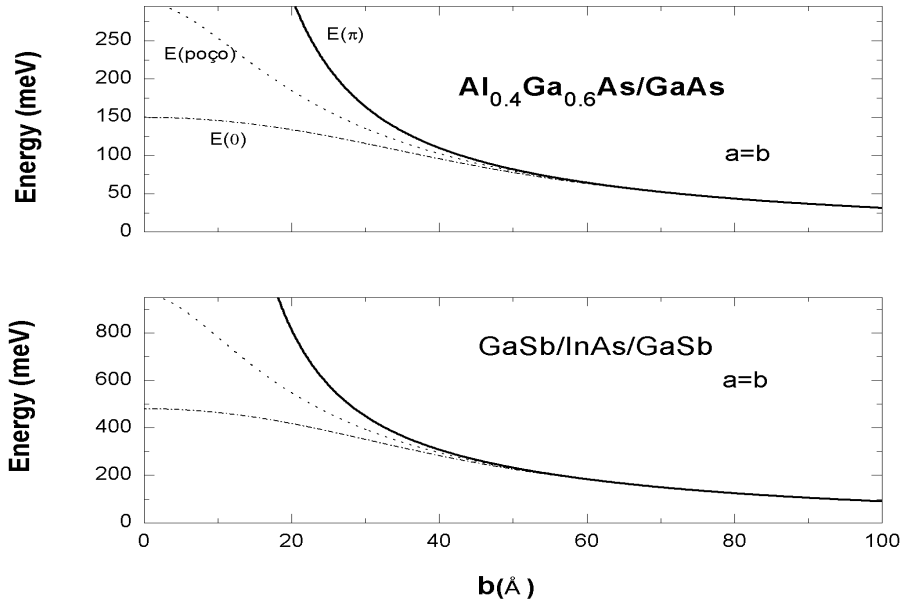


Figura 1.5 - Limites inferiores ($k = 0$) e superiores ($k = \pi$) das minibandas de energia para super-redes distintas (indicadas na figura) com período $L=a+b$. Para efeito de comparação, também mostramos a energia para o estado fundamental dos poços quânticos correspondentes, ou seja, $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ e $\text{GaSb}/\text{InAs}/\text{GaSb}$, e sua variação com a largura do poço.

O estudo das super-redes chamadas ideais, ou perfeitas, é de grande interesse do ponto de vista conceitual, pois estas redes podem ser identificadas como cristais artificiais. O que abre espaço para a engenharia de novos materiais, que se caracterizam por uma simetria de translação espacial.

Entretanto, as técnicas atuais de crescimento dos materiais ainda não permitem a produção de estruturas com um número suficientemente grande de camadas, que, do ponto de vista prático, poderiam constituir uma super-rede perfeita. Assim, as estruturas de múltiplos poços apresentam uma perspectiva de estudo mais realista, considerando o atual estágio do desenvolvimento das técnicas de crescimento. Nesse contexto, os poços quânticos duplos são um sistema de grande interesse, onde permitindo explorar conceitos que estão além daqueles estabelecidos para poços quânticos simples, como, por exemplo, o conceito de acoplamento entre poços quânticos. tais estrutura separados por uma barreira de potencial finita

Conceito de acoplamento entre poços para estados ligados está diretamente relacionado ao fenômeno de tunelamento através da barreira central. Para uma barreira central finita, existe a probabilidade não nula de que o elétron seja encontrado na região da barreira, e na medida em que aumentamos a largura da barreira, a probabilidade de transmissão do elétron através dela diminui. Para uma determinada largura chamada largura crítica,

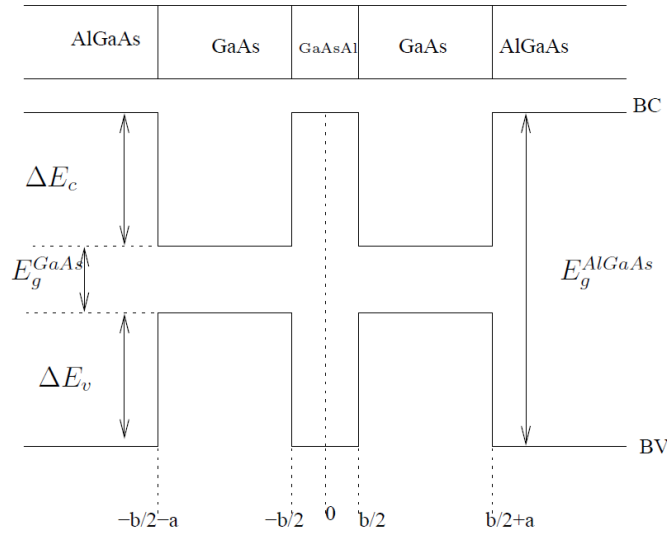


Figura 1.6 - Ilustração do potencial das bandas de valência e condução para um poço quântico duplo com poços de largura a e barreira central de largura b .

a probabilidade de transmissão é nula, é dito então que os poços estão desacoplados, situação em que o sistema pode ser como dois poços simples isolados.

A figura . 1.6 ilustra dois poços quânticos de largura a separados por uma barreira central de altura V_0 e largura b . De acordo com essa ilustração, o potencial de confinamento pode ser expresso da seguinte forma:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } b/2 < |z| < b/2 + a \\ V_0 & \text{se } |z| < b/2 \\ V_0 & \text{se } b/2 + a < |z| < \infty, \end{cases} \quad (1.15)$$

As soluções são conhecidas e assumem superposições de ondas planas nas regiões dos poços e ondas evanescentes nas regiões da barreiras, isso levando-se em conta a possibilidade de tunelamento através da barreira central:

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_1 = Dexp(-k_b z) & \text{se } z > b/2 + a \\ \psi_2 = A sen(k_w z) + B cos(k_w z) & \text{se } b/2 < z < b/2 + a \\ \psi_3 = C[exp(k_b z) \pm exp(-k_b z)] & \text{se } b/2 > |z| \\ \psi_4 = \mp A sen(k_w z) \pm B cos(k_w z) & \text{se } -b/2 > z > -b/2 - a \\ \psi_5 = \pm Dexp(-k_b z) & \text{se } z < -b/2 - a, \end{cases} \quad (1.16)$$

Agora devemos aplicar as condições de contorno. Em $z = b/2$, tem-se

$$A \sin(k_w \frac{b}{2}) + B \cos(k_w \frac{b}{2}) = C[\exp(k_b \frac{b}{2}) \pm \exp(k_b \frac{b}{2})], \quad (1.17)$$

e

$$A \frac{k_w}{m_w} \cos(k_w \frac{b}{2}) - B \frac{k_w}{m_w} \cos(k_w \frac{b}{2}) = C \frac{k_b}{m_b} [\exp(k_b \frac{b}{2}) \mp \exp(k_b \frac{b}{2})]. \quad (1.18)$$

Em $z = b/2 + a$, tem-se

$$A \sin(k_w(\frac{b}{2} + a)) + B \cos(k_w(\frac{b}{2} + a)) = D[\exp(-k_b(\frac{b}{2} + a))], \quad (1.19)$$

e

$$A \frac{k_w}{m_w} \cos(k_w \frac{b}{2}) - B \frac{k_w}{m_w} \sin(k_w \frac{b}{2}) = -D \frac{k_b}{m_b} [\exp(k_b(\frac{b}{2} + a))]. \quad (1.20)$$

Como resultado temos um sistema homogêneo de equações para os coeficientes A, B, C e D. Por meio de manipulações algébricas, são obtidas duas expressões para os níveis de energia, onde os sinais (+) e (-) referem-se aos estados com paridade ímpar e par, respectivamente gráfica 1.7.

$$2 \cos(k_w a) + \left(\frac{m_w k_b}{k_w m_b} - \frac{k_w m_b}{m_w k_b} \right) \sin(k_w a) \pm \left(\frac{m_w k_b}{k_w m_b} - \frac{k_w m_b}{m_w k_b} \right) \sin(k_w a) \exp(-k_b b) = 0 \quad (1.21)$$

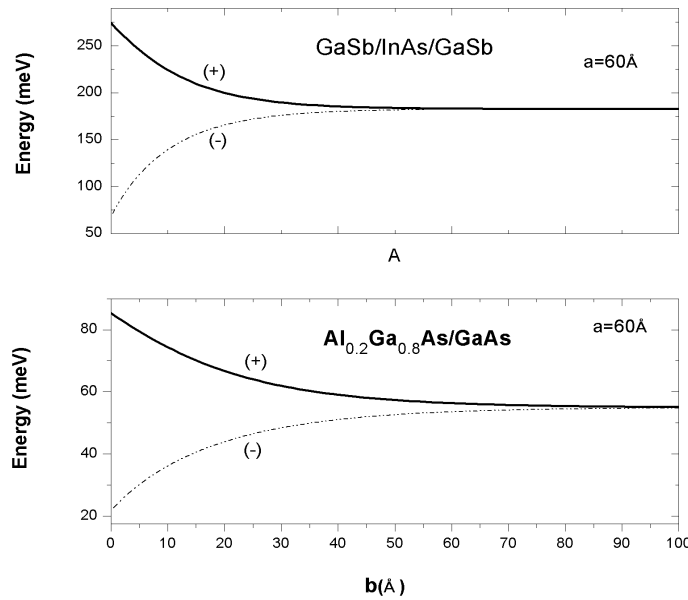


Figura 1.7 - Níveis de energia para estados com paridade ímpar (-) e par (+) para os poços quânticos duplos simétricos indicados na figura e sua variação em função da largura da barreira central b .

Embora o conceito de acoplamento entre poços quânticos esteja bem estabelecido na

literatura especializada, o estudo do fator g de spin e, particularmente, de sua anisotropia, ainda representa um problema em aberto de grande interesse no escopo da física das nanoestruturas semicondutoras. O objetivo central deste trabalho reside no estudo da relação entre o efeito de acoplamento entre poços quânticos semicondutores e a anisotropia associada ao fator g de spin, também conhecida como anisotropia giromagnética.

Com o intuito de contextualizar o problema, nesta primeira parte do trabalho são introduzidos os conceitos e um formalismo básico, que permite estudar a estrutura eletrônica de heteroestruturas semicondutoras, a partir da aproximação de banda única; primeiramente abordando o caso mais simples, ou seja, o poço quântico simples. Em seguida são encontradas as soluções para uma super-rede infinita, utilizando a simetria da estrutura e aplicando o modelo de Kronig-Penney, o que permite obter as chamadas minibandas de energia

Por fim, abordado um caso intermediário - o caso de dois poços quânticos acoplados. Neste sentido, são obtidos os níveis de energia aplicando a continuidade da função de onda e de sua derivada nas diferentes interfaces.

No próximo capítulo, será apresentada fundamentação teórica sobre a qual este trabalho foi desenvolvido, com a aproximação de elétrons independentes.

Em seguida, será introduzido o método de múltiplas bandas baseado no método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$, que permite explorar as propriedades das bandas de energia e as funções de onda nas vizinhanças de um dos pontos de alta simetria da primeira zona de Brillouin. Este método permite obter a estrutura de bandas conhecendo um pequeno número de parâmetros, como, por exemplo a massa efetiva e a energia de gap do material, que podem ser determinados experimentalmente com boa precisão. Com base no método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$, o modelo de Kane (KANE, 1982) utiliza um número reduzido de bandas e possibilita um estudo analítico das propriedades eletrônicas de semicondutores com estrutura cristalina do tipo *zinc blende*. Para além dos semicondutores volumétricos, no caso das heteroestruturas semicondutoras, uma extensão da teoria de massa efetiva, conhecida como aproximação de função envelope (LUTTINGER; KOHN, 1955) é aplicada. No caso das heteroestruturas com mudança abrupta do gap de energia nas interfaces, o potencial das bandas varia em uma escala distinta daquela considerada para o potencial do *bulk*. Assim, com as funções de Bloch localizadas nos sítios da rede, a função envelope deve variar lentamente com relação a estas funções, de forma que a função de onda para o elétron deve se apresentar como o produto de ambas funções, por meio dessas aproximações pode-se obter uma equação de massa efetiva para a banda de condução. Essa formulação permite estudar as heteroestruturas semicondutoras a partir do modelo Kane

↔ × ↔

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Aspectos básicos e aproximações

Para estudar um sólido cristalino partindo da resolução da equação de Schrödinger, é necessário especificar as coordenadas \mathbf{R}_j de todos dos íons formados pelos núcleos e os pelos elétrons fortemente ligados às camadas mais internas, como também as coordenadas dos elétrons de valência, \mathbf{r}_i , além de suas respectivas massas M e m_0 . Dessa forma, o Hamiltoniano do sistema pode ser escrito como

$$H = - \sum_j \frac{\hbar^2}{2M_j} \nabla_{\mathbf{R}_j}^2 - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \quad (2.1)$$

$$+ \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\sum_{j>j'} \frac{e^2 Z_j Z_{j'}}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}|} + \sum_{i>i'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} + \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_j}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{r}_i|} \right),$$

em um sistema de 10^{23} partículas por cm^3 , a solução é impraticável. Por esse propõe-se uma aproximação que permita dividir o problema em duas partes: uma que trata do problema eletrônico e outra que trata do problema iônico. Com isso, é possível ater-se apenas ao tratamento dinâmico dos elétrons.

O grande número de partículas existentes em um cristal impossibilita achar a solução exata para o Hamiltoniano (2.1). Assim, os procedimentos geralmente utilizados fazem uso de certas aproximações; a primeira aproximação, considera os núcleos em repouso, pois a energia cinética dos elétrons é muito maior que a dos núcleos. Assume-se, assim, que a energia internuclear é constante, de forma que a equação (2.2) pode ser reescrita:

$$\left[\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\sum_{i>i'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} + \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_j}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{r}_i|} \right) \right] \Psi_e = E \Psi_e. \quad (2.2)$$

A *utra* é a aproximação de Hartree-Fock, a energia de interação de pares de elétrons $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i>i'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|}$ é substituída por pares de elétrons com um campo médio, $\sum_i \nu_i(\mathbf{r}_i)$. Da mesma forma, a energia da interação dos elétrons com os núcleos é substituída por $\sum_i \Pi_i$. Assim, o hamiltoniano dependerá apenas da posição \mathbf{r}_i de cada elétron

$$H_i = \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_{r_i}^2 + \Pi_i + \nu_i \quad (2.3)$$

$$H = \sum_i H_i \quad (2.4)$$

Portanto, a função de onda total é tal que

$$\Psi_e = \Psi_1 \Psi_2 \Psi_3 \dots \Psi_n \quad (2.5)$$

e a energia total será a soma das energias dos elétrons, ou seja,

$$E = \sum_i E_i, \quad (2.6)$$

onde temos, para cada elétron,

$$H_i \Psi_i = E_i \Psi_i. \quad (2.7)$$

Como os átomos em um cristal estão dispostos de maneira periódica, o potencial correspondente deve ser tal que $V(\mathbf{r}_i) = \Pi_i + \nu_i$, e, com isso, segue que

$$H_i = \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_{r_i}^2 + V(\mathbf{r}_i). \quad (2.8)$$

Assim, por meio dessa série de aproximações, transformamos um problema de muitas partículas interagentes em um problema equivalente de apenas um corpo.

2.2 Teoria de massa efetiva \mathbf{k}, \mathbf{p}

O método \mathbf{k}, \mathbf{p} permite explorar as propriedades das bandas de energia e as funções de onda nas vizinhanças dos pontos de alta simetria da zona de Brillouin, através da teoria perturbativa. Com este método, mostra-se que a estrutura de bandas em torno dos pontos de alta simetria depende de um pequeno número de parâmetros, como, por exemplo, massa efetiva e o *gap* de energia do material, que podem ser determinados experimentalmente com boa precisão. Assim, para um ponto \mathbf{k} pertencente à primeira zona de Brillouin, podemos obter a estrutura de bandas em torno desse ponto. O método \mathbf{k}, \mathbf{p} utiliza como base o teorema de Bloch, de forma que, inicialmente, é possível obter considerar um elétron sob a influência de um potencial periódico:

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (2.9)$$

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (2.10)$$

onde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 são chamados de vetores primitivos e n_1 , n_2 e n_3 são números inteiros. Qualquer ponto de rede com vetor posição \mathbf{R} pode ser obtido através de uma combinação linear dos vetores primitivos, como se diz os vetores primitivos geram a rede. A função de onda deve satisfazer a equação de Schroedinger:

$$H|\Psi(\mathbf{r})\rangle = \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] |\Psi(\mathbf{r})\rangle = \varepsilon(\mathbf{k})|\Psi(\mathbf{r})\rangle. \quad (2.11)$$

O hamiltoniano acima é invariante mediante a operação de translação espacial, ou seja, $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{R}$. Então, se $|\Psi(\mathbf{r})\rangle$ descreve o movimento do elétron em um cristal, a solução geral para equação é dada por:

$$|\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle, \quad (2.12)$$

$$|u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})\rangle = |u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle. \quad (2.13)$$

Sabendo que operador momentum é dado por $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$, pode se escrever

$$\mathbf{p} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}) |u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle \quad (2.14)$$

Aplicando teoria perturbativa, e reorganizando os termos da equação diferencial:

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}{m} \right] |u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = \left[E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] |u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle \quad (2.15)$$

A equação (2.15) representa uma equação de autovalores para as funções $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ normalizadas no volume de uma célula unitária do cristal. O operador H da equação anterior apresenta número infinito de soluções com autovalores discretos segundo o índice \mathbf{k} . Para um valor fixo de \mathbf{k} (como $\mathbf{k} = (0,0,0)$) a equação admite um conjunto completo de soluções,

$$|u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = \sum_m |a_m(\mathbf{k})u_{n,0}\rangle. \quad (2.16)$$

O hamiltoniano não perturbado é tal que $H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$, o termo perturbativo é dado por $H' = \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}{m}$ e a energia: $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Assim temos

$$[H_0 + H']|u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k})|u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle \quad (2.17)$$

Assumindo que conhecemos a solução da equação anterior na proximidade do ponto $\mathbf{k} = (0,0,0)$, então, aplicando a teoria perturbativa, tem-se

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \langle u_{n,0}|H'|u_{n,0}\rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{\langle u_{n,0}|H'|u_{n,0}\rangle \langle u_{n',0}|H'|u_{n',0}\rangle}{E_n(0) - E_{n'}(0)}. \quad (2.18)$$

O termo de primeiro ordem $\langle u_{n,0}|H'|u_{n,0}\rangle$ decai rapidamente nos extremos das bandas em sistemas com simetria de inversão. Os elementos de matriz podem ser escritos como:

$$\langle u_{n,0}|H'|u_{n,0}\rangle = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \langle u_{n,0}|\mathbf{p}|u_{n,0}\rangle \quad (2.19)$$

$$\varepsilon_n(\vec{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2}{m^2} k_\alpha k_\beta \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'|p_\alpha|n\rangle \langle n|p_\beta|n'\rangle|}{E_n(0) - E_{n'}(0)} \quad (2.20)$$

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} k_\alpha k_\beta \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'|p_\alpha|n\rangle \langle n|p_\beta|n'\rangle|}{E_n(0) - E_{n'}(0)} \quad (2.21)$$

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha,\beta} k_\alpha k_\beta \left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha,\beta} \quad (2.22)$$

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha,\beta} = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m} + \sum_{n' \neq n} \frac{2|\langle n'|p_\alpha|n\rangle \langle n|p_\beta|n'\rangle|}{m^2(E_n(0) - E_{n'}(0))}. \quad (2.23)$$

Na maioria de processos optoeletrônicos termos c e v fazem alusão às bandas de condução e valência respectivamente. $E_c(0) - E_v(0) = E_g$ é o *gap* de energia e

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{\alpha,\beta} = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m} + \frac{2|\langle v|p_\alpha|c\rangle \langle c|p_\beta|v\rangle|}{m_0^2 E_g} \quad (2.24)$$

Tabela 2.1 - Valores da massa efetiva para $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ para diferentes semicondutores (YU; CARDONA, 1996)

	Ge	GaN	GaAS	GaSb	InP	InAs	ZnS	ZnSe	ZnTe	CdTe
E_g [eV]	0.89	3.44	1.55	0.81	1.34	0.45	3.80	2.82	2.39	1.59
$m^*/m_0(\text{exp})$	0.041	0.17	0.067	0.047	0.073	0.026	0.20	0.134	0.124	0.093
m^*/m_0	0.04	0.17	0.078	0.04	0.067	0.023	0.16	0.14	0.12	0.08

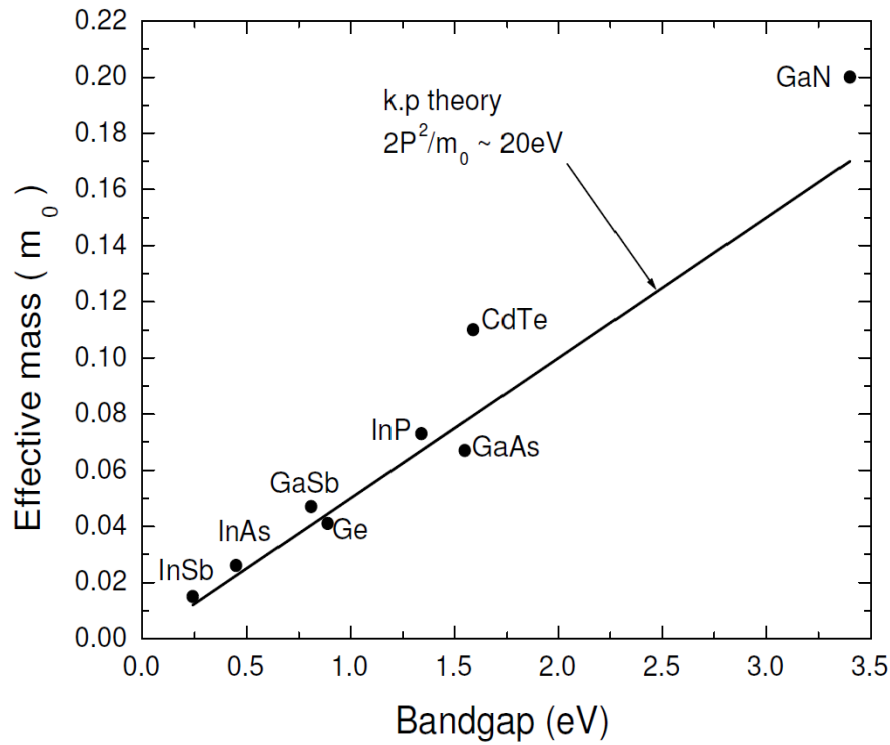


Figura 2.1 - Massa efetiva na banda condução para o modelo k.p, a linha reta é uma boa aproximação

Os resultados obtidos para as massas efetivas por meio do método **k.p** figura 2.1, com relação aos resultados obtidos para as massas efetivas a partir dos diferentes experimentos, apresentam um melhor acordo para materiais que possuem um menor *gap* de energia, o que representa um limite de aplicabilidade para o método **k.p**. Uma pequena massa efetiva significa que a energia cinética aumenta rapidamente com o vetor de onda \mathbf{k} , energia que logo se torna comparável ao valor do *gap*, forma o termo perturbativo em \mathbf{k} alcança rapidamente um valor maior do que a energia de separação entre os estados ditos não-perturbados.

2.2.1 Modelo de Kane

Este modelo permite estudar os efeitos decorrentes do acoplamento entre a banda de condução (E_c) e as bandas de valência (E_v). Inicialmente, deve ser ignorado o efeito de spin e o problema é resolvido considerando três bandas, ou seja, são consideradas consideramos a banda de condução e a degenerescência da banda de valência, isto é,

$$H_0|S\rangle = E_{c,0}|\lambda\rangle, \quad (2.25)$$

com $\lambda = S, X, Y, Z$, onde o hamiltoniano H_0 esta dado:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}). \quad (2.26)$$

Expandindo $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ na base $|S\rangle$, $|X\rangle$, $|Y\rangle$ e $|Z\rangle$, tem-se

$$u_{n,\mathbf{k}}(r) = \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} a_\lambda|\lambda\rangle \quad (2.27)$$

Substituindo a equação (2.27) na equação (2.15) e efetuando o produto escalar por $\langle\ell|$ com o intuito de obter-se os autovalores de energia, tem-se

$$\langle\ell| \left(H_0 + \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \right) \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} a_\lambda|\lambda\rangle = \langle\ell| \left(E_n(\mathbf{k}) \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} a_\lambda|\lambda\rangle \right) \quad (2.28)$$

ou

$$\sum_{\lambda=S,X,Y,Z} \left\{ \left[E_\lambda(k=0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - E_n(\mathbf{k}) \right] \delta_{\ell\lambda} + \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{k} \cdot \langle\ell|\hat{\mathbf{p}}|\lambda\rangle \right\} a_\lambda = 0. \quad (2.29)$$

onde¹

$$\langle S|\hat{\mathbf{p}}|X\rangle = \langle S|\hat{\mathbf{p}}|Y\rangle = \langle S|\hat{\mathbf{p}}|Z\rangle = i \frac{m_e}{\hbar} \sqrt{\frac{3}{2}} P. \quad (2.30)$$

¹Veja, por exemplo, a Ref. (DAVIES, 1998).

$$\begin{bmatrix} E_{c,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} & i\sqrt{\frac{3}{2}}Pk_x & i\sqrt{\frac{3}{2}}Pk_y & i\sqrt{\frac{3}{2}}Pk_z \\ i\sqrt{\frac{3}{2}}Pk_x & E_{v,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} & 0 & 0 \\ i\sqrt{\frac{3}{2}}Pk_y & 0 & E_{v,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} & 0 \\ i\sqrt{\frac{3}{2}}Pk_z & 0 & 0 & E_{v,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} a_s \\ a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix} = E_{n,\mathbf{k}} \begin{bmatrix} a_s \\ a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix}$$

calculando o determinante, tem-se:

$$\begin{aligned} & \left(E_{n,\mathbf{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - E_{v,0} \right)^2 \quad (2.31) \\ \times & \left[\left(E_{n,\mathbf{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \right)^2 - \left(E_{n,\mathbf{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \right) (E_{c,0} + E_{v,0}) + E_{c,0}E_{v,0} - \left(\sqrt{\frac{3}{2}}k|P| \right)^2 \right] = 0. \end{aligned}$$

Os autovalores de energia são:

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{HH}(\mathbf{k}) = E_{v,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad (2.32)$$

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{CB}(\mathbf{k}) = \frac{E_{v,0} + E_{c,0}}{2} + \sqrt{\left(\frac{E_{c,0} - E_{v,0}}{2} \right)^2 + \left(\sqrt{\frac{3}{2}}k|P| \right)^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad (2.33)$$

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{LH}(\mathbf{k}) = \frac{E_{v,0} + E_{c,0}}{2} - \sqrt{\left(\frac{E_{c,0} - E_{v,0}}{2} \right)^2 + \left(\sqrt{\frac{3}{2}}k|P| \right)^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}. \quad (2.34)$$

Expandindo as Eqs.(2.32,2.33,2.34) em séries de Taylor, obtem-se:

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{CB}(\mathbf{k}) = E_{c,0} + \frac{3}{2} \frac{k^2 |P|^2}{E_g} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad (2.35)$$

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{LH}(\mathbf{k}) = E_{v,0} - \frac{3}{2} \frac{k^2 |P|^2}{E_g} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad (2.36)$$

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{HH}(\mathbf{k}) = E_{v,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad (2.37)$$

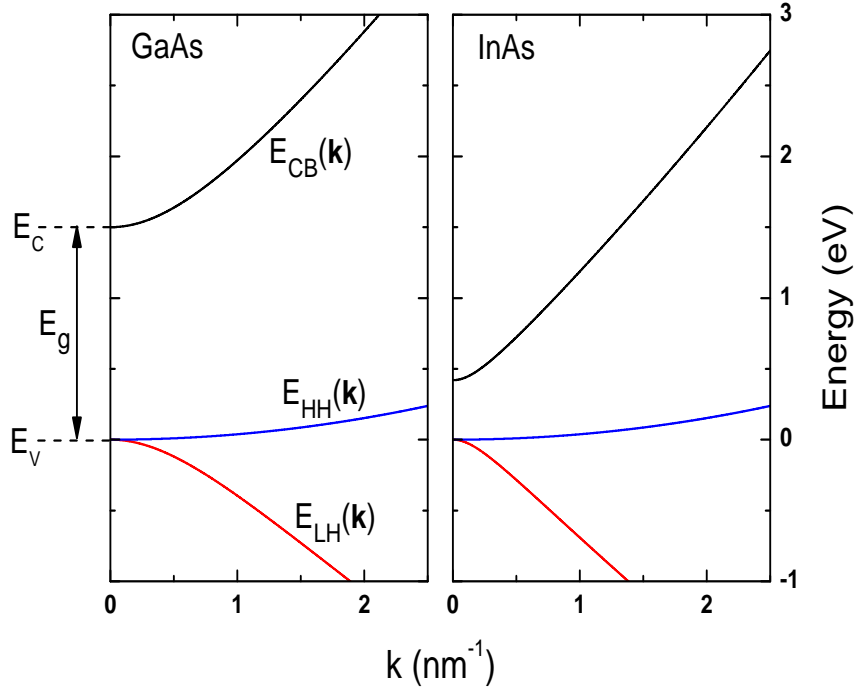


Figura 2.2 - Estrutura de bandas para o modelo de Kane de três bandas ([SANDOVAL, 2014](#)).

Portanto cada banda terá um espectro equivalente ao de partícula livre com uma correspondente massa efetiva figura 2.2

$$\frac{1}{m_{CB}} = \frac{1}{m_e} \left(1 + 3 \frac{m_e P^2}{\hbar^2 E_g} \right) \quad (2.38)$$

$$\frac{1}{m_{LH}} = \frac{1}{m_e} \left(1 - 3 \frac{m_e P^2}{\hbar^2 E_g} \right) \quad (2.39)$$

$$m_{HH} = m_e \quad (2.40)$$

Os termos que permitem obter o valor de P são estimados de acordo com a seguinte relação: $E_p = \frac{3}{2} \frac{2m_e}{\hbar^2} P^2 = 22eV$ ([DAVIES, 1998](#)). Então, assumindo $E_g = 1.5eV$ para a liga binária GaAs, obtêm-se os valores $m_{CB} = 0.061m_e$ e $m_{LH} = 0.073m_e$; em ótimo acordo tanto com os valores medidos (valores experimentais), quanto com os valores provenientes de cálculos mais elaborados. Assim distinguimos as massas para os estados de condução (m_{CB}), para buracos leves (m_{LH}) e para buracos pesados (m_{HH}). Fica evidente que o modelo não consegue descrever adequadamente a relação de dispersão para buracos pesados, para estes estados perde-se a informação sobre a renormalização da massa.

2.2.2 Interação spin-órbita

O acoplamento spin órbita (SO) é bem conhecido para o átomo de hidrogênio. O efeito de acoplamento spin-órbita foi estimado por Sommerfeld e deu lugar a constante de estrutura fina, $\alpha_{FS} \approx \frac{1}{137}$. A razão entre a energia de interação spin-órbita e o hamiltoniano sem interação com spin-órbita é dada por $\frac{H_{so}}{H_0} \approx \alpha_{FS}^2$. Claramente, este termo é uma pequena contribuição ao hamiltoniano total.

Pelo contrario em nanoestruturas semicondutoras o acoplamento spin-órbita depende fortemente do campo elétrico que confina o movimento dos elétrons no plano. Existem dois acoplamentos spin órbita na literatura, o de Rashba (BYCHKOV; RASHBA, 1984), quando há uma assimetria no perfil do potencial do poço, e o de Dresselhauss, quando não há simetria de inversão na rede cristalina.

Neste trabalho será somente o efeito Rashba, o acoplamento spin-órbita na forma

$$H'_{S.O} = \frac{1}{2m^2c^2}(\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{S}, \quad (2.41)$$

em que fator 2 é adicionado para explicar a diferença entre as previsões feitas pela teoria e, as observações experimentais. Uma discussão detalhada pode ser encontrada no livro de Sin-itiro Tomonaga (TOMONAGA, 1997), sendo um efeito relativístico, o acoplamento SO é obtido, segundo a formulação relativística da mecânica quântica, tomando-se o limite de baixas energias, e considerando termos primeira ordem em $1/c^2$. Sempre que o potencial seja do tipo central $V(\mathbf{r}) = V(r)$, temos

$$H'_{S.O.atomico} = \xi(r) \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (2.42)$$

esta interação spin-órbita produz um desdobramento de energia correspondente aos diferentes valores do momento angular total J

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (2.43)$$

tomando os elementos de matrix na base $|j, l, s, m_j\rangle$, o numero quântico j pode assumir apenas os valores $j = |l - s|, (|l - s| + 1), \dots, l + s$. Calculando o valor esperado de $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ na base $|j, l, s, m_j\rangle$:

$$\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2}[j(j + 1) - l(l + 1) - s(s + 1)]. \quad (2.44)$$

o estado atômico p, com, $l = 1, s = 1/2$, onde os valores permitidos para este numero quântico são: $j = 3/2$ e $j = 1/2$, como mostra a representação pictórica presente na figura 2.3.

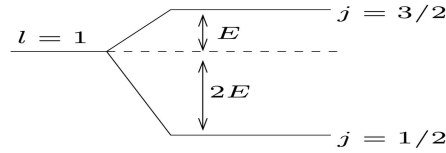


Figura 2.3 - representação pictórica para o desdobramento da energia para o nível $l=1$

A magnitude da interação spin órbita depende do valor esperado para o termo $\xi(r)$, definido pela equação.

$$\langle n, j, l, s, m_j | H | n, j, l, s, m_j \rangle = \langle n, j, l, s, m_j | H | n, j, l, s, m_j \rangle \int_0^\infty R_{nl} \xi(r) R_{nl} dr, \quad (2.45)$$

onde

$$\Phi = Y_{lm}(\theta, \phi) R_{nl}(r), \quad (2.46)$$

$R_{nl}(r)$ representa a parte radial da função de onda atômica. A integral da equação (2.45) aumenta rapidamente com o número atômico ($\simeq Z^4$), a dependência com o numero atômico z se deve ao maior numero de elétrons presente nos átomos mais pesados o que gera um campo magnético mais intenso , como mostra na Fig. 2.4.

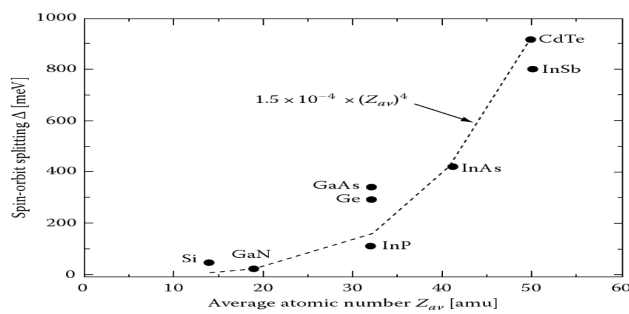


Figura 2.4 - Número atômico promécio vs *spin orbit splitting*.

A introdução da interação spin-órbita foi fundamental para melhorar o acordo entre os resultados teóricos e experimentais, uma vez que a degenerescência dos níveis de energia pode ser levada em consideração nos cálculos, sendo dada por :

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m^2c^2}(\nabla\mathbf{V} \times \mathbf{p}) \cdot \sigma, \quad (2.47)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

onde σ são as matrizes de Pauli, tomando como quantização do spin o eixo y. Aplicando o operador spin-órbita H_{so} sobre a parte periódica da função de Bloch, encontram-se que o hamiltoniano total do sistema na representação \mathbf{k}, \mathbf{p} dado por:

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}(\mathbf{k}) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m^2c^2}(\nabla\mathbf{V} \times \mathbf{p}) \cdot \sigma + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\nabla\mathbf{V} \times \mathbf{k}) \cdot \sigma. \quad (2.48)$$

O último termo da equação (2.48) é proporcional \mathbf{k} , estimativas feitas por (KANE, 1982) indicam que a contribuição desse termo corresponde a menos de um por cento do valor do hamiltoniano total do sistema sobre as bandas de energia.

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}(\nabla\mathbf{V} \times \mathbf{p}) \cdot \sigma, \quad (2.49)$$

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) = H_0 + H_{so}. \quad (2.50)$$

Escrevendo o segundo termo da equação(2.47) como

$$(H_{so})_{11} = -iC \left(\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (2.51)$$

$$(H_{so})_{12} = -iC \left\{ \left(\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) - i \left(\frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right\} \quad (2.52)$$

$$(H_{so})_{21} = -iC \left\{ \left(\frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) + i \left(\frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right\} \quad (2.53)$$

$$(H_{so})_{22} = iC \left(\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (2.54)$$

de onde segue a representação matricial:

$$H_{so} = \begin{pmatrix} (H_{so})_{11} & (H_{so})_{12} \\ (H_{so})_{21} & (H_{so})_{22} \end{pmatrix}.$$

Considere a equação de autovalor para $H_0 + H_{so}$ na base em que H_0 é diagonal, ou seja

$$\begin{pmatrix} H_0 + (H_{so})_{11} & (H_{so})_{12} \\ (H_{so})_{21} & H_0 + (H_{so})_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b(\mathbf{r}) \\ c(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \mathbf{1}E \begin{pmatrix} b(\mathbf{r}) \\ c(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

As componentes $b(\mathbf{r})$ e $c(\mathbf{r})$ do spinor devem ser escritas nas base $\{|S\rangle, |X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$:

$$b(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} b_\lambda |\lambda\rangle, \quad (2.55)$$

$$c(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} c_\lambda |\lambda\rangle. \quad (2.56)$$

Tem-se, portanto, o sistema de equações

$$\sum_{\lambda=S,X,Y,Z} \left[(H_0 + (H_{so})_{11}) b_\lambda + (H_{so})_{12} c_\lambda \right] |\lambda\rangle = E \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} b_\lambda |\lambda\rangle, \quad (2.57)$$

$$\sum_{\lambda=S,X,Y,Z} \left[(H_{so})_{21} b_\lambda + (H_0 - (H_{so})_{22}) c_\lambda \right] |\lambda\rangle = E \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} c_\lambda |\lambda\rangle. \quad (2.58)$$

onde os únicos elementos de matriz não nulos são:

$$\begin{aligned} \langle X|(H_{so})_{11}|Y\rangle &= -\langle X|(H_{so})_{22}|Y\rangle = -i\frac{\Delta}{3}, \\ \langle Y|(H_{so})_{12}|Z\rangle &= \langle Y|(H_{so})_{21}|Z\rangle = -i\frac{\Delta}{3}, \\ \langle X|(H_{so})_{12}|Z\rangle &= -\langle X|(H_{so})_{21}|Z\rangle = \frac{\Delta}{3}. \end{aligned}$$

Define-se o parâmetro dimensão de energia, conhecido como *split-off*, e que corresponde ao desdobramento da energia, no ponto Γ , provocado pela interação spin-órbita, conforme

segue

$$\Delta = -3i \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} \langle X | \left(\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \right) | Z \rangle. \quad (2.59)$$

As Eqs. (2.57) e (2.58) podem ser expressas pelo seguinte sistema

$$\begin{pmatrix} E_c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_c & 0 & i\Delta/3 & 0 & 0 & -i\Delta/3 & 0 \\ 0 & 0 & E_v & 0 & 0 & i\Delta/3 & 0 & -\Delta/3 \\ 0 & -i\Delta/3 & 0 & E_v & 0 & 0 & \Delta/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\Delta/3 & 0 & 0 & E_v & 0 & -i\Delta/3 \\ 0 & i\Delta/3 & 0 & \Delta/3 & 0 & 0 & E_v & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta/3 & 0 & 0 & i\Delta/3 & 0 & E_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_s \\ b_x \\ b_y \\ b_z \\ c_s \\ c_x \\ c_y \\ c_z \end{pmatrix} = \mathbf{1}E \begin{pmatrix} b_s \\ b_x \\ b_y \\ b_z \\ c_s \\ c_x \\ c_y \\ c_z \end{pmatrix}$$

ou de forma equivalente

$$\begin{pmatrix} E_c - E & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_c - E & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & E_v - E & -i\Delta/3 & i\Delta/3 \\ 0 & 0 & i\Delta/3 & E_v - E & \Delta/3 \\ 0 & 0 & -i\Delta/3 & \Delta/3 & E_v - E \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_v - E & -i\Delta/3 & -i\Delta/3 \\ 0 & 0 & i\Delta/3 & E_v - E & -\Delta/3 \\ 0 & 0 & i\Delta/3 & -\Delta/3 & E_v - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_s \\ c_s \\ b_x \\ c_y \\ b_z \\ c_x \\ b_y \\ c_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Diagonalizando a matriz anterior encontram-se a base de autovetores com a respectivas energias para $\mathbf{k} = 0$. Introduzindo a interação spin-órbita, têm-se os três grupos de estados degenerados, dois com energia igual a zero; correspondente à banda de condução que não é afetada pela interação spin-órbita, quatro estados com energia $E_v = E'_v + \Delta/3$ e dois com energia $E_v = E'_v - \frac{2}{3}\Delta$. O valor de E'_v corresponde à energia associada ao topo da banda de valência, na ausência da interação spin-órbita, o que significa que o efeito de interação spin-órbita foi deixar inalterada a banda de condução, além do aumento quatro bandas em $\Delta/3$ e baixar em um fator de $-\frac{2}{3}\Delta$, das outras duas bandas. Mostrando que os extremos das bandas de condução e de valência ocorrem no ponto $\Gamma(\mathbf{k} = 0)$, onde é definido o *gap* fundamental do semiconductor, E_g . Neste ponto, na ausência de spin, o ramo mais baixo da banda de condução é não degenerada, e a banda de valência tem

triple degenerescência, da interação spin-órbita quebra parcialmente a degenerescência na banda de valência, separando as bandas de buraco pesado *heavy-hole* $|HH\rangle$ e buraco leve *light-hole* $|LH\rangle$ da banda *split-off* $|SO\rangle$, esta separação em energia entre os dois grupos de bandas afetadas por a interação spin orbita no ponto $\mathbf{k} = 0$ é expressada com o simbolo Δ . A figura 2.5 mostra a estrutura de bandas considerando o efeito de interação spin-órbita com quatro bandas, sendo cada uma delas degeneradas por o spin. A banda de condução não sofre influência direta da interação spin órbita.

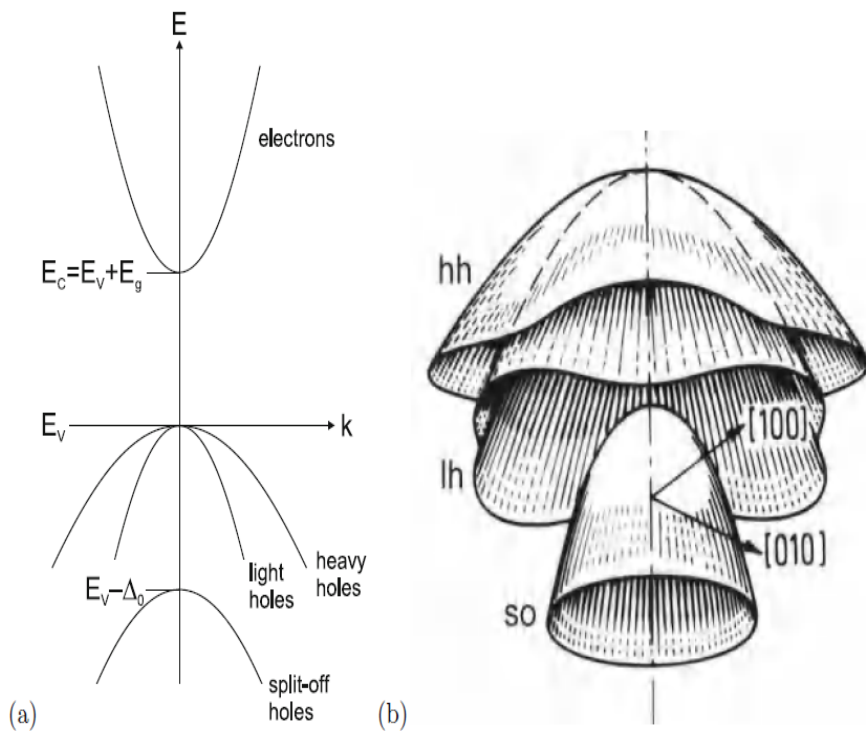


Figura 2.5 - Bandas de energia consideradas no modelo de Kane 8x8

No modelo desenvolvido a direção de quantização de spin é paralela ao eixo y , o que significa que passamos de diagonalizar a base J^2, J_z para diagonalizar a base J^2, J_y , fazendo permutações cíclicas dos eixos, $(Z \rightarrow Y), (X \rightarrow Z), (Y \rightarrow X)$, por tanto a representação matricial $H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{8 \times 8}$ Tab.2.2 utilizada neste trabalho (SILVA, 1992), além desta representação matricial existem outras ²

²escolha das bases ver apêndice C

Tabela 2.2 - Representação matricial $H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{8 \times 8}$ obtida na base $\{|n, \sigma_y\rangle\}$.

	$ CB, +\rangle$	$ LH, +\rangle$	$ HH, +\rangle$	$ SO, +\rangle$	$ CB, -\rangle$	$ LH, -\rangle$	$ HH, -\rangle$	$ SO, -\rangle$
$\langle CB, + $	E_c	$P \left(ik_z - \frac{k_x}{2} \right)$	$-\frac{\sqrt{3}}{2} P k_x$	$\frac{P}{\sqrt{2}} (ik_z + k_x)$	0	$i \frac{P}{2} k_y$	$-\frac{\sqrt{3}}{2} P k_y$	$-i \frac{P}{\sqrt{2}} k_y$
$\langle LH, + $	$P \left(-ik_z - \frac{k_x}{2} \right)$	E_v	0	0	$i \frac{P}{2} k_y$	0	0	0
$\langle HH, + $	$-\frac{\sqrt{3}}{2} P k_x$	0	E_v	0	$-\frac{\sqrt{3}}{2} P k_y$	0	0	0
$\langle SO, + $	$\frac{P}{\sqrt{2}} (-ik_z + k_x)$	0	0	$E_v - \Delta$	$-i \frac{P}{\sqrt{2}} k_y$	0	0	0
$\langle CB, - $	0	$-i \frac{P}{2} k_y$	$i \frac{\sqrt{3}}{2} P k_y$	$i \frac{P}{\sqrt{2}} k_y$	E_c	$P \left(ik_z + \frac{k_x}{2} \right)$	$\frac{\sqrt{3}}{2} P k_x$	$\frac{P}{\sqrt{2}} (ik_z - k_x)$
$\langle LH, - $	$-\frac{P}{2} k_y$	0	0	0	$P \left(-ik_z + \frac{k_x}{2} \right)$	E_v	0	0
$\langle HH, - $	$i \frac{\sqrt{3}}{2} P k_y$	0	0	0	$\frac{\sqrt{3}}{2} P k_x$	0	E_v	0
$\langle SO, - $	$i \frac{P}{\sqrt{2}} k_y$	0	0	0	$\frac{P}{\sqrt{2}} (-ik_z - k_x)$	0	0	$E_v - \Delta$

2.3 Aproximação de função envelope

No caso das heteroestruturas semicondutoras, deve ser considerado o alinhamento das bandas de energia na medida em que são intercaladas ligas compostas por semicondutores distintos. A variação das bandas de energia ao longo da direção de crescimento pode ser tratada de forma eficiente e muito elegante por meio da aproximação de função envelope, amplamente utilizada no estudo das propriedades ópticas, elétricas das heteroestruturas semicondutoras. A aproximação de função envelope pode ser vista com uma extensão do método $\mathbf{k.p}$, considerando, como postulado, que a função de onda pode ser escrita como a soma sobre as componentes das bandas consideradas no modelo. Onde as componentes da função de onda são dadas pelo produto de uma função que varia lentamente em relação ao parâmetro de rede, denotada por $f_l^{AB}(r)$, pela função de Bloch corresponde, isto é

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_l f_l^{A,B} u_{l,\mathbf{k}_0}^{AB}(\mathbf{r}), \quad (2.60)$$

a ideia é que, em cada ponto, a função de onda seja descrita pela decomposição $\mathbf{k.p}$. Além disso, presume-se que:

- a) a função envelope varia lentamente em comparação com a função de onda Bloch, onde $f_l^{A,B}(r)$ é escrita como uma representação de Fourier e os vetores de onda estão próximos do centro da zona de Brillouin.
- b) as funções de Bloch são idênticas em ambos materiais, ou seja, $u_{n,\mathbf{k}_0}^A(r) = u_{n,\mathbf{k}_0}^B(r)$, logo os elemento da matriz interbanda $\langle S|p_x|X \rangle$ são iguais em ambos materiais.

Em função da invariância translacional no plano, a função de onda pode ser escrito como um produto entre ondas planas (restritas ao plano $x - y$) e uma função que varia na direção de crescimento

$$f_l(r_\perp, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{ik_\perp \cdot r_\perp} \chi_l(z), \quad (2.61)$$

Em que o eixo z é escolhido como a direção de crescimento e $k_\perp = (k_x, k_y)$ é o vetor de onda no plano. Note-se que esta convenção gera confusão na literatura como o sinal \perp pode significar tanto perpendicular ao plano das camadas ou para o eixo de crescimento. O hamiltoniano é:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V_A(r)Y_A + V_B(r)Y_B, \quad (2.62)$$

$Y_A(z)$ e $Y_B(z)$ é uma função de grau nas respectivas camadas. Vamos desenvolver nosso sistema perto de $\mathbf{k} = 0$. Para resolver o sistema, deve-se considerar as seguintes operações:

a) Vamos agir H sobre $\Psi(r)$

b) Multiplicar a esquerda por $u_{m0}^*(r)e^{-ik_\perp \cdot r_\perp} \chi_m^*(z)$ e integrar sobre o espaço.

As seguintes relações devem ser usada e: como a função de envelope varia lentamente, pode ser escrito

$$\int_{cell} d^3r f_l^* f_m u_l^* u_m = f_l^* f_m u_l^* u_m \int_{cell} d^3r u_l^* u_m = f_l^* f_m \delta_{lm} \quad (2.63)$$

tirando proveito do fato de que o limite de *band edge* são as funções do Hamiltoniano em $\mathbf{k} = \mathbf{0} = (0, 0, 0)$:

$$\left(\frac{p^2}{2m_0} + V^{AB}(r) \right) u_{n0}(r) = \varepsilon_{m,0}^{A,B} u_{m,0}(r), \quad (2.64)$$

A pesar do fato da derivação ser trabalhosa,, mas deve-se notar a semelhança com o método perturbativo $\mathbf{k.p}$, considerando a ação do operador p sobre a função de onda:

$$p(e^{-ik_\perp \cdot r_\perp} \chi_l(z) u_l(r)) = (\hbar k_\perp - i\hbar \frac{\partial}{\partial z} + p) e^{-ik_\perp \cdot r_\perp} \chi_l(z) u_l(r), \quad (2.65)$$

e considerar a substituição

$$p \rightarrow (\hbar k_\perp - i\hbar \frac{\partial}{\partial z} + p), \quad (2.66)$$

onde entende-se que p age apenas sobre a parte da função de onda de Bloch. Usando a referida substituição no Hamiltoniano obtêm-se finalmente obtemos o seguinte conjunto de equações diferenciais, que pode ser escrito em uma forma matricial:

$$D(z, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}) \chi = \varepsilon \chi, \quad (2.67)$$

com os elementos de matriz D dados pela equação:

$$D_{lm} = \left(\varepsilon_l^A Y_A + \varepsilon_l^B Y_B + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \delta_{l,m} + \frac{\hbar k_\perp}{m_0} \langle l|p_\perp|m\rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle l|p_z|m\rangle \frac{\partial}{\partial z}, \quad (2.68)$$

onde

$$\langle l|p|m\rangle = \int_{cell} u_l^* u_m dr, \quad (2.69)$$

O limite de integração *cell* é o volume da célula unitária pertencente ao material A ou B, de acordo com a posição do vetor \mathbf{r} na heteroestrutura. A equação (2.68) nada mais é que a matriz $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ para materiais no *bulk* com certas modificações, a componente k_z é substituída pelo operador $-i\frac{\partial}{\partial z}$. Os extremos da banda apresentam dependência com a posição variando nas interfaces, o comportamento dos portadores de carga em uma heteroestrutura, sob a condição de banda plana (SHAM; NAKAYAMA, 1979).

Considerando a ausência total de cargas nas heteroestruturas. As cargas nas regiões próximas as interfaces podem modificar o potencial cristalino; por tanto o método de massa efetiva não funciona. A fabricação de dispositivos envolve a criação de interfaces entre diferentes materiais, a caracterização e a medida de defeitos nesses dispositivos envolve a aplicação de campos eletromagnéticos; por tanto quebras-se a periodicidade desses sistemas, o que impede o uso do teorema de Bloch, para estes problemas é usada a aproximação de função envelope figura (2.6), que é uma adaptação da teoria da massa efetiva ao problema de impurezas (LUTTINGER; KOHN, 1955). Nesta teoria os campos externos variam em uma escala de distancia muito maior que o parâmetro de rede do material por tanto são constante dentro de cada cela unitária, as funções no ponto $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ são idênticas para todos os materiais na heteroestrutura,

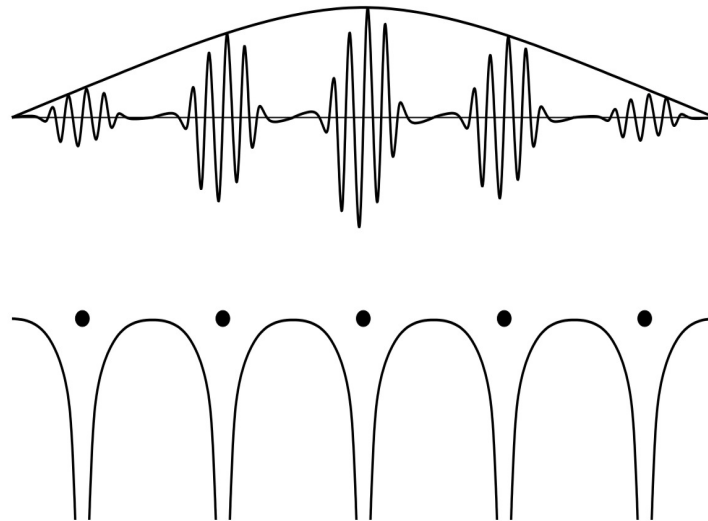


Figura 2.6 - representação esquemática da função de onda envelope, a figura de embaixo representa o potencial periódico, e a parte da acima mostra a variação lenta da função envelope modulada por rápida oscilação na rede da função de onda Bloch (WINKLER, 2003)

2.3.1 Efeito do campo magnético

A equação de Schrödinger não contém o spin. Em 1930 Paul Dirac foi capaz deduzir uma equação incluindo, de forma consistente, o spin para as duas teorias, Mecânica Quântica e Relatividade Especial. Chamada de equação de Dirac esta principal equação da Mecânica Quântica Relativística. Ela está incompleta porque os campos eletromagnéticos são clássicos. A teoria completa, a eletrodinâmica quântica (QED), leva em conta o caráter quântico dos campos e é teoricamente consistente com Mecânica Quântica, e a Relatividade Especial. No caso de um elétron não-relativista, uma equação simples pode ser usada, conhecida como equação de Pauli. É possível utilizar a equação de Pauli introduzindo o efeito de um campo magnético através do acoplamento mínimo $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}$, onde q a carga do elétron e \mathbf{A} é o potencial vetor,

$$H = \frac{(p + eA)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m}(p^2 + e\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + e\mathbf{A}\mathbf{p} + e^2A^2) + V(\mathbf{r}), \quad (2.70)$$

$$H = \frac{1}{2m}(p^2 + e\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + V(\mathbf{r})) \simeq H_0 + \frac{e}{m}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}. \quad (2.71)$$

Escolhendo o calibre (gauge) de Coloumb, ou seja, $\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$, com campo magnético dado por $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, verifica-se que o último termo do hamiltoniano acima ($\frac{e}{m}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$) pode ser considerado pequeno. Em geral, esse termo descreve muitos fenômenos provocados pela da interação da radiação com a matéria, mas, neste caso, considerando considerar apenas átomos afetados por um campo magnético externo constante. O Hamiltoniano correspondente, escolhendo o potencial vetor $\mathbf{A} = \mathbf{B} \times \mathbf{r}/2$, é tal que

$$H = H_0 + \frac{e}{2m}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})\cdot\mathbf{p} = H_0 + \frac{e}{2m}\mathbf{B}(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = H_0 + \frac{e}{2m}\mathbf{B}\cdot\mathbf{L} = H_0 - \mu_L\cdot\mathbf{B}, \quad (2.72)$$

o momento angular orbital $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. O ultimo termo da equação anterior corresponde a energia do momento magnético $\mu_L = \frac{e}{2m}\mathbf{L} = \mu_B\mathbf{L}$ na presença de um campo magnético constante, $H = -\mu\cdot\mathbf{B}$. Por tanto tem-se o momento magnético de spin do elétron clássico e quântico, sim embargo o momento magnético intrínseco do elétron vale ($\mu_e = -g_e\mu_B\mathbf{S}_e \simeq -2\mu_B\mathbf{S}_e = \frac{e\sigma}{2m}$). o elétron é afetado por seu próprio campo magnético³, esta contribuição tem que ser incluída, o novo hamiltoniano é:

$$H = H_0 + \frac{e}{2m}\mathbf{B}\cdot\mathbf{L} - \mu_e\cdot\mathbf{B} = H_0 + \mu_B\mathbf{L}\cdot\mathbf{B} + g_e\mu_B\mathbf{S}\cdot\mathbf{B} \simeq H_0 + \mu_B(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})\cdot\mathbf{B}, \quad (2.73)$$

³o momento magnético intrínseco do elétron é dado $\mu_e = -g_e\mu_B\mathbf{S}_e \simeq -2\mu_B\mathbf{S}_e = \frac{-e\sigma}{2m}$, (BRANSDEN B. H.,) com $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5.8\cdot 10^{-5} \text{ eV/Tesla}$. Experimental $\frac{g}{2} = 1.0011596521884(43)$ a ecuação de Dirac predice $g = 2$ e QED $g_e = 2(1 + a)$ com $a = \alpha/2\pi - 0.38(\alpha/\pi)^2 + \dots$

2.3.2 Níveis de Landau

Escolhendo o potencial vetor no chamado *gauge* de Landau $\mathbf{A} = (zB, 0, 0)$ e considerando um campo magnetico na direção y $\mathbf{B} = B\hat{y}$ o hamiltoniano do sistema é dado:

$$H = \frac{1}{2m^*}p_y^2 + \frac{1}{2m^*}p_z^2 + \frac{1}{2}\left(p_x + \frac{ezB}{c}\right)^2 = \frac{1}{2m^*}k_y^2 + \frac{1}{2m^*}k_z^2 + \frac{1}{2}m^*\omega_c^2(z + z_0)^2, \quad (2.74)$$

escolhendo uma função de onda do tipo

$$\psi = \exp(ik_x)\exp(ik_z)F(z), \quad (2.75)$$

$$\left[\frac{1}{2m^*}p_y^2 + \frac{1}{2m^*}(2e\hbar k_x B_y z + e^2 B_z^2 z^2) \right] F(z) = \varepsilon' F(z), \quad (2.76)$$

$$\varepsilon = \varepsilon' + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}, \quad (2.77)$$

$$z_0 = \frac{\hbar k_x}{eB_y}. \quad (2.78)$$

A equação de Schroedinger independentemente do tempo pode ser escrita como:

$$\left[\frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{e^2 B_z^2 z^2}{2m^*} (z - z_0) \right] F(z) = \left(\varepsilon' + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \right) F(z) = \left(\varepsilon + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \right) F(z). \quad (2.79)$$

Fazendo a mudança de variáveis

$$\xi = z - z_0. \quad (2.80)$$

A equação pode ser colocada na forma

$$\left[\frac{p_\xi^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega_c^2 \xi^2 \right] F(\xi) = \left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \right) F(\xi). \quad (2.81)$$

Dessa maneira, o problema fica reduzido à equação de Schrödinger de um oscilador Harmônico unidimensional com frequência básica

$$\omega_c = \frac{eB_y}{m^*}. \quad (2.82)$$

A energia do movimento ciclotronico figura 2.7 é dada por:

$$\varepsilon = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}. \quad (2.83)$$

Nota-se que a equação (2.83) tem uma grande degenerescência, que depende da escolha do centro da orbita (k_x) onde N é o número quântico do nível de Landau

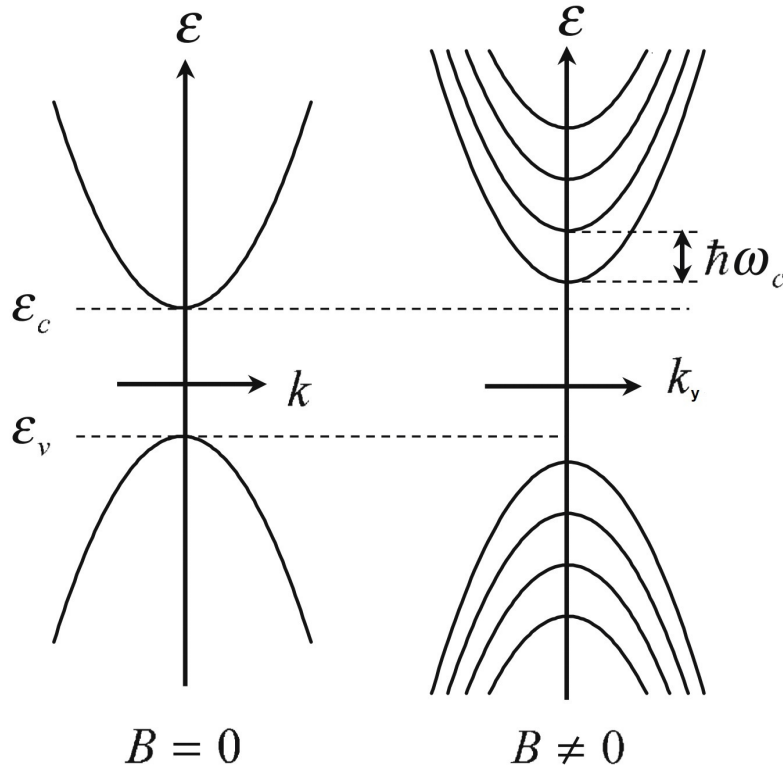


Figura 2.7 - Esquema ilustrativo dos níveis de Landau

Como dito anteriormente a equação de Dirac prevê um fator de Lande igual a 2. Muitas outras correções relativistas têm que ser levadas em consideração quando o elétron está se movendo em um átomo, neste modelo simplesmente toma-se g como um pouco maior que 2. Para portadores de carga em semicondutores o fator g tem que ser renormalizado em função da estrutura de bandas, este fator g^* efetivo por analogia com a massa efetiva m^* , a degenerescência de spin é resolvido pelo efeito Zeeman, ficando a equação (2.83) como:

$$\varepsilon = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + \frac{1}{2} \mu_0 g^* \sigma B. \quad (2.84)$$

2.3.3 Hamiltoniano de massa efetiva

Na presença de campos magnéticos os estados de energia dos elétrons nos múltiplos poços apresetam uma quebra de degenerescência de spin, que tem relação com efeito Zeeman. Nesta seção será estudado o efeito que o campo magnético causa sobre os portadores de carga confinados em um sistema de poços quânticos, com o campo magnético perpendicular a direção de crescimento na nanoestrutura eixo z . O problema a ser tratado consiste de poço quântico duplo altura finita V_0 entre os poços. Tomando a direção do confinamento paralela eixo z figura (2.8), assume-se que a simetria de translação fica conservada no plano x - y , e a função de onda é tal que:

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{ik_x x} e^{ik_y y} \sum_n f_n(z) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.85)$$

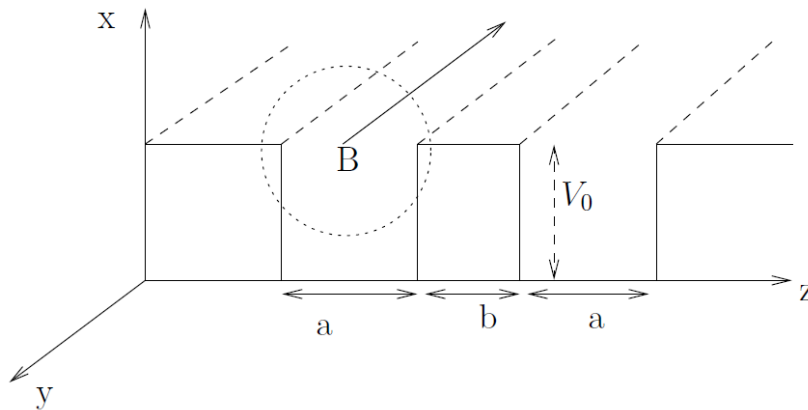


Figura 2.8 - Esquema ilustrativo de um poço quântico duplo finito com campo magnético aplicado perpendicular a direção de crescimento z .

Então, nesta situação, o movimento livre ao longo $x - y$, Além disso, colocando o campo magnético ao longo de da direção y , movimento livre acontece ao longo da direção do campo magnético, enquanto que nas outras duas direções tem-se confinamento quântico. Como mostra a literatura (MARQUES; SHAM, 1982; GERCHIKOV; SUBASHIEV, 1992; SILVA et al., 1994), em uma heteroestrutura com a configuração acima descrita, pode ser de grande utilidade levar em conta a simetria do sistema e, além de escolher \mathbf{z} como direção de crescimento, e \mathbf{y} como direção de quantização de spin. Nesse caso, $H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{8 \times 8}$ mostrado na Tab. 2.2 terá uma representação matricial diagonal por blocos conforme segue.

A aproximação de função envelope (equação. 2.85), conquanto que $k_z \rightarrow -id/dz$. Então, considerando a descontinuidade nas bandas de condução $E_c(z)$, valência $E_v(z)$, o *split-off*

$\Delta(z)$ e introduzindo nos elementos da diagonal da matriz acima o potencial mesoscópico de confinamento $v(z)$, tem-se

$$H_{eff\uparrow\downarrow}^{4\times 4} \mathbf{F}_{\uparrow\downarrow} = \mathbf{1}\varepsilon_{\uparrow\downarrow} \mathbf{F}_{\uparrow\downarrow} \quad (2.86)$$

ou ainda

$$\begin{pmatrix} E_c(z) + v(z) & P\left(\frac{d}{dz} \mp \frac{\mathbf{k}_x}{2}\right) & \mp \frac{\sqrt{3}}{2} P\mathbf{k}_x & \frac{P}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dz} \pm \mathbf{k}_x\right) \\ P\left(-\frac{d}{dz} \mp \frac{\mathbf{k}_x}{2}\right) & E_v(z) + v(z) & 0 & 0 \\ \mp \frac{\sqrt{3}}{2} P\mathbf{k}_x & 0 & E_v(z) + v(z) & 0 \\ \frac{P}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{dz} \pm \mathbf{k}_x\right) & 0 & 0 & E_v(z) - \Delta(z) + v(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{CB}^{\uparrow\downarrow} \\ f_{LH}^{\uparrow\downarrow} \\ f_{HH}^{\uparrow\downarrow} \\ f_{SO}^{\uparrow\downarrow} \end{pmatrix} = \mathbf{1}\varepsilon_{\uparrow\downarrow} \begin{pmatrix} f_{CB}^{\uparrow\downarrow} \\ f_{LH}^{\uparrow\downarrow} \\ f_{HH}^{\uparrow\downarrow} \\ f_{SO}^{\uparrow\downarrow} \end{pmatrix}.$$

Nesta seção será representado o formalismo desenvolvido que permite estudar o fator g de spin para estados de condução e sua anisotropia em heteroestruturas semicondutoras, por meio da teoria de perturbativa de primeira ordem.

Para tanto, considere inicialmente um poço quântico semiconductor com um campo magnético externo uniforme orientado paralelamente à interface do poço. Utilizando o calibre de Landau $\mathbf{A} = Bz \mathbf{e}_x$ (com o acoplamento mínimo $\mathbf{k}_x \rightarrow k_x + \frac{e}{\hbar} A_x = k_x + z/l^2$, onde $-e$ é a carga do elétron) e efetuando a projeção do hamiltoniano de massa efetiva sobre os estados de condução, têm-se

$$H_{\sigma}^{eff} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z, \varepsilon_{\sigma})} \frac{d}{dz} + \frac{1}{2} \frac{m_e^2}{m^*(z, \varepsilon_{\sigma})} \omega_c (z - z_0)^2 + E_c(z) + v(z) + \frac{1}{2} g^*(z, \varepsilon_{\sigma}) \mu_B \sigma B, \quad (2.87)$$

onde $\sigma = \pm$, observe que $z_0 = -\ell^2 k_x$ define o centro da órbita ciclotrônica, onde $\ell = \sqrt{\hbar/eB}$ é o comprimento magnético, $\mu_B = e\hbar/2m_e$ é o magnéton de Bohr e o parâmetro de acoplamento Rashba é tal que $\alpha_R(z, \varepsilon_{\sigma}) = \frac{d}{dz} \eta(z, \varepsilon_{\sigma})$. Os termos $m(z, \varepsilon_{\sigma})$ e $\eta(z, \varepsilon_{\sigma})$ são descritos segundo as expressões:

$$g^*(z, \varepsilon_{\sigma}) = g_e - \frac{4m_e}{\hbar^2} \left[\alpha_R(z, \varepsilon_{\sigma}) (z - z_0) + \eta(z, \varepsilon_{\sigma}) + \eta_{rem} \right], \quad (2.88)$$

$$\eta(z, \varepsilon_{\sigma}) = \frac{P^2}{2} \left[\frac{1}{\varepsilon_{\sigma} - v(z) - E_v(z)} - \frac{1}{\varepsilon_{\sigma} - v(z) - E_v(z) + \Delta(z)} \right] \quad (2.89)$$

e

$$\frac{1}{m(z, \varepsilon_\sigma)} = \frac{P^2}{\hbar^2} \left[\frac{2}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z)} + \frac{1}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z) + \Delta(z)} \right] \quad (2.90)$$

Em que P são elementos de matriz (de mesmo valor) do operador momentum (KANE, 1982)

O Hamiltoniano 2.87 tem limites importantes:

- Se $B = 0$, temos o Hamiltoniano de Kane para, o acoplamento spin órbita para Rashba é recobrado (GERCHIKOV; SUBASHIEV, 1992; SILVA et al., 1994; SILVA et al., 1997), o sistema restaura a simetria de translação no plano $x - y$.
- Sem interação spin-órbita $\Delta(z) = 0$, os níveis de Landau como solução da equação de massa efetiva resultante (BROZAK et al., 1990). ($\eta(z, \varepsilon_\sigma) \rightarrow 0$).
- se $v(z) = 0$, o limite do *bulk* for restabelecido: banda de condução não parabólica para modelo Kane, onde o efeito Zeeman é renormalizado apenas pela interação do elétron com o rede cristalina (KIM et al., 1989), se o valor da energia no fundo da banda de condução chegamos a formula de Roth (ROTH et al., 1959) que consegue explicar o fator g para semicondutores III-V. O fator g pode variar, por exemplo, de $\sim -0,5$ no GaAs para ~ -50 no InSb, e tal variação pode ser explicada pela fórmula de Roth:

$$g^* = 2 \left(1 - \frac{m_e}{m^*} \frac{\Delta}{3E_g + 2\Delta} \right). \quad (2.91)$$

A expressão acima foi obtida por Roth, Lax e Zwerdling (ROTH et al., 1959) pela da teoria de perturbação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de segunda ordem, equação (2.91) corresponde à solução exata para o modelo de Kane considerando a energia no fundo da banda de condução (KIM et al., 1989). Em geral, a equação (2.91) é um caso particular ⁴ da equação (2.88), é claro que o fator g efetivo dependerá do campo magnético. Mas, de uma análise mais apurada vê-se que, $g = constante$ já que está sendo feita uma análise perturbativa de primeira ordem, a análises tem só vale para campos magnéticos pequenos.

O abordagem para tratar anisotropia do fator g , é feita mediante a teoria perturbativa de primeira ordem, para isto é preciso considerar o termo independente do spin da equação

⁴ver apêndice C

(2.87) no limite de campo nulo

$$H_0\psi^0(z) = \varepsilon_0\psi^0(z). \quad (2.92)$$

Si considerado o campo magnético paralelo a direção de crescimento da heroestrutura, como mostra na seguinte figura 2.9, nesta situação o fator giromagnético será normalizado pelo termo do *bulk*. Isso porque o parâmetro de acoplamento Rashba anula-se, obtêm-se então anisotropia como a diferença entre o valor - do fator giromagnético obtido para as diferentes configurações que o campo magnético assume em relação a hetoestrutura

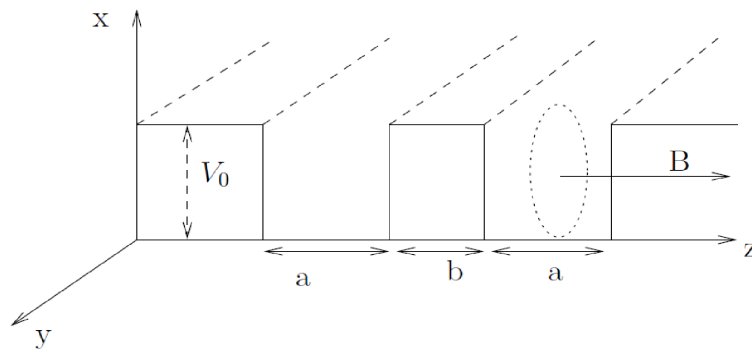


Figura 2.9 - Esquema ilustrativo de um poço quântico duplo finito com campo magnético aplicado paralelo a direção de crescimento z.

$$\Delta g_{DQW} = \frac{4m_e}{\hbar^2} \langle \psi_{1,2,3}^0 | \alpha_R(z, \varepsilon_0) (z - z_0) | \psi_{1,2,3}^0 \rangle, \quad (2.93)$$

aplicando a equação(2.93) para o poço quântico duplo obtemos a expressão para anisotropia

$$\Delta g_{DQW} = \Delta g_1 + \Delta g_2 + \Delta g_3, \quad (2.94)$$

$$\Delta g_1 = \frac{4m_e}{\hbar^2} \left[-2 \left(\frac{b}{2} + a \right) \left| \psi_1^2 \left(\frac{b}{2} + a \right) \right| \right] \eta_b, \quad (2.95)$$

$$\Delta g_2 = \left(\frac{4m}{\hbar^2} \right) 2 \left[\left(\frac{b}{2} + a \right) \left| \psi_2^2 \left(\frac{b}{2} + a \right) \right| - \frac{b}{2} \left| \psi_2^2 \left(\frac{b}{2} \right) \right| \right] \eta_w, \quad (2.96)$$

$$\Delta g_3 = \frac{4m}{\hbar^2} \left[b \left| \psi_3^2 \left(\frac{b}{2} \right) \right| \right] \eta_b. \quad (2.97)$$

Onde ψ_1, ψ_2, ψ_3 , são as funções de onda de poço duplo nas diferentes interfaces, e são definidas no capítulo de introdução, a e b são a largura do poço e barreira respetivamente

3 RESULTADOS

A estrutura eletrônica das super-redes é caracterizada pela formação de minibandas de energia e, de forma análoga ao que ocorre nos sólidos cristalinos, essas minibandas são separadas por zonas proibidas dos elétrons. A Figura 3.1 mostra os limites inferior e superior da primeira minibanda de uma super-rede de GaSb/InAs onde foi utilizado o modelo de Kronig-Penney para calcular a energia das minibanda em função da distância de estruturas periódicas (KRONIG; PENNEY, 1931), as curvas contínuas (linhas vermelhas) mostram os resultados obtidos na aproximação de massa efetiva de oito bandas e as tracejadas são os resultados obtidos pela aproximação banda única

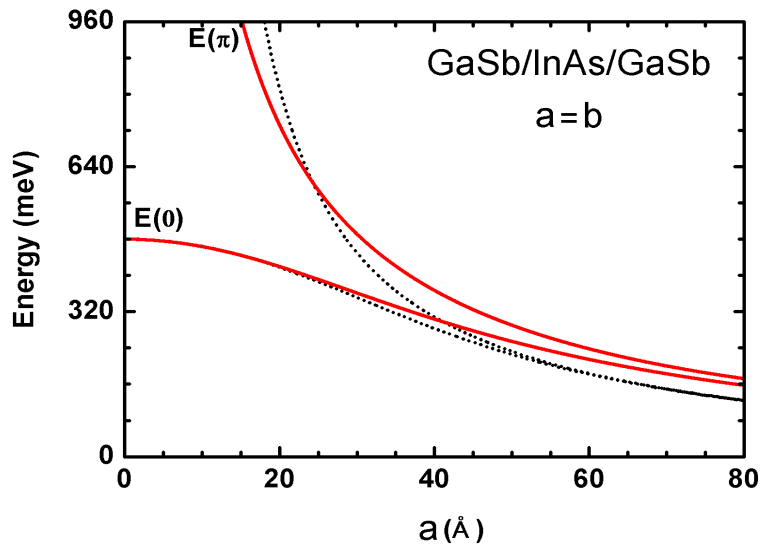


Figura 3.1 - Os níveis de energia para $k = 0$ e para $k = \pi$ definem, respectivamente, os limites inferior e superior da primeira minibanda que caracteriza a super-rede. As curvas contínuas mostram os resultados obtidos com o modelo de Kane de oito bandas com os parâmetros $m^* = 0.023$, $E_g = 0.418$ eV, $\Delta = 0.38$ eV e $\delta g_{rem} = -0.5$ para o InAs e $m^* = 0.041$, $E_g = 0.81$ eV, $\Delta = 0.76$ eV e $\delta g_{rem} = -2.2$ para o GaSb. e as tracejadas o limite de banda única.

No gráfico da figura (3.1) pode ser visto como a diferença entre o modelo de uma banda e, o modelo de oito bandas, para a super-rede, fica em evidência a diferença energética entre o limite superior $k = \pi$ e ou inferior $k = 0$ da primeira minibanda de energia. O modelo de oito bandas converge mais rapidamente para zero que o modelo de uma banda. O principal sistema investigando é o poço duplo simétrico, onde o estado fundamental da partícula se separa em estados simétrico e anti-simétricos com níveis de energia distintos, que dependem da largura e da altura da barreira central, para o modelo de uma banda (linhas pretas), e o modelo de oito bandas (linhas vermelhas)

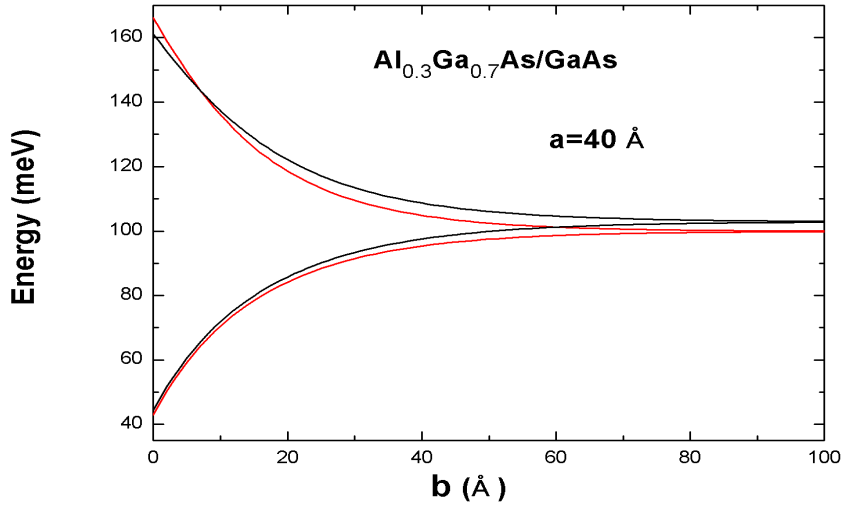


Figura 3.2 - Energia dos níveis eletrônicos, para os estados simétrico e anti-simétrico, em função da largura da barreira central, com largura poço $a=40\text{Å}$ para um poço quântico duplo simétrico $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$, $m_w^* = 0.067m_e$, $E_g^w = 1.52\text{ eV}$, $\Delta^w = 0.34\text{ eV}$, $\delta g_{rem}^w = -0.50$, $E_g^b = 1.94\text{ eV}$, $\Delta^b = 0.32\text{ eV}$, $\delta g_{rem}^b = 0.13$ e $v_0 = 0.277\text{ eV}$.

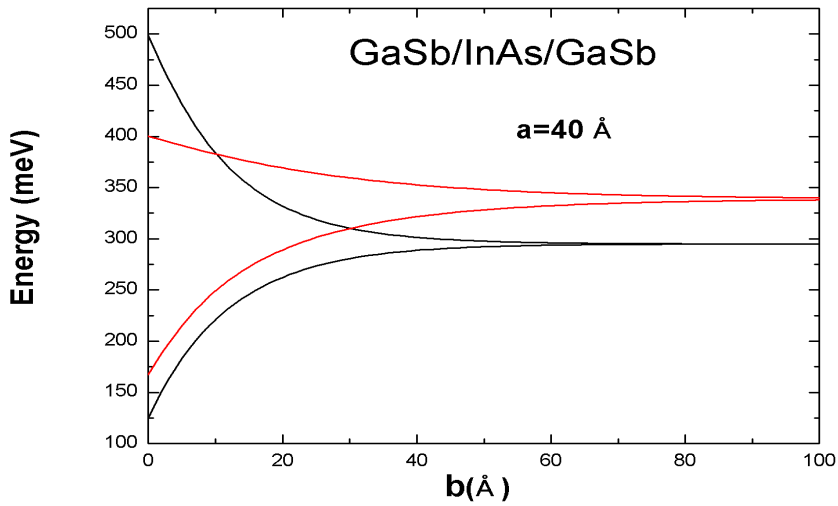


Figura 3.3 - Energia dos níveis eletrônicos, para os estados simétrico e anti-simétrico, em função da largura da barreira central para um poço quântico duplo simétrico (com poços de InAs de largura $a=40\text{Å}$ e barreiras de GaSb), $m^* = 0.023$, $E_g = 0.418\text{ eV}$, $\Delta = 0.38\text{ eV}$ e $\delta g_{rem} = -0.5$ para o InAs e $m^* = 0.041$, $E_g = 0.81\text{ eV}$, $\Delta = 0.76\text{ eV}$ e $\delta g_{rem} = -2.2$ para o GaSb

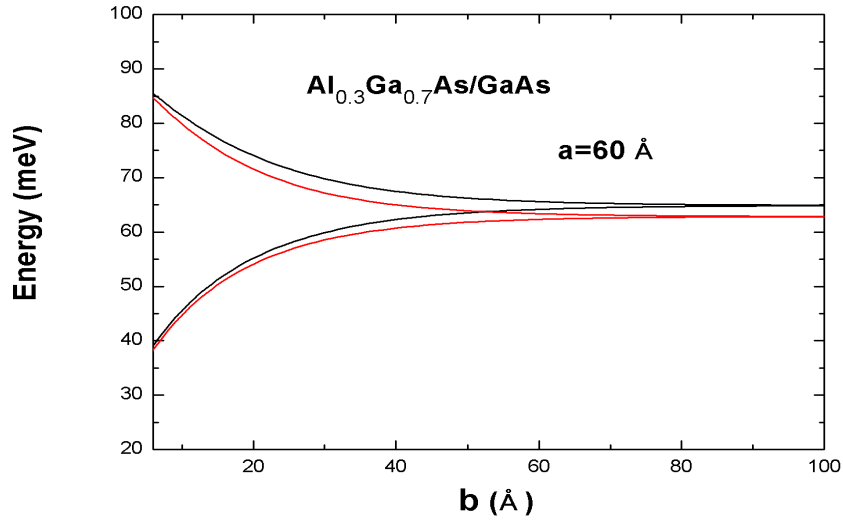


Figura 3.4 - Energia dos níveis eletrônicos, para os estados simétrico e anti-simétrico, em função da largura da barreira central, com largura poço $a=60\text{Å}$ para um poço quântico duplo simétrico $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$, $m_w^* = 0.067m_e$, $E_g^w = 1.52\text{ eV}$, $\Delta^w = 0.34\text{ eV}$, $\delta g_{rem}^w = -0.50$, $E_g^b = 1.94\text{ eV}$, $\Delta^b = 0.32\text{ eV}$, $\delta g_{rem}^b = 0.13$ e $v_0 = 0.277\text{ eV}$.

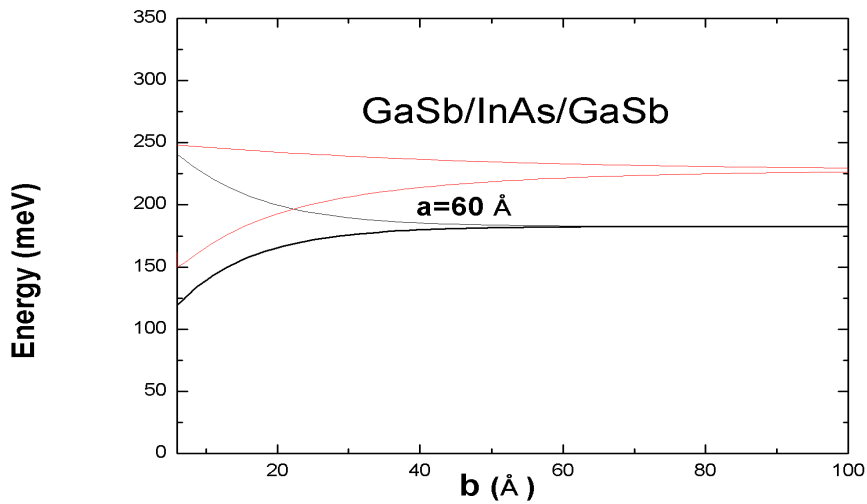


Figura 3.5 - Energia dos níveis eletrônicos, para os estados simétrico e anti-simétrico, em função da largura da barreira central para um poço quântico duplo simétrico (com poços de InAs de largura $a=60\text{Å}$ e barreiras de GaSb), $m^* = 0.023$, $E_g = 0.418\text{ eV}$, $\Delta = 0.38\text{ eV}$ e $\delta g_{rem} = -0.5$ para o InAs e $m^* = 0.041$, $E_g = 0.81\text{ eV}$, $\Delta = 0.76\text{ eV}$ e $\delta g_{rem} = -2.2$ para o GaSb.

Observa-se nos gráficos (3.2,3.3 e 3.4), fixando o valor da largura do poço em 40\AA , no caso da liga semicondutora $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$, aparece um *splitting* de energia entre o nível simétrico e ou nível antissimétrico. Este diminui com a separação (desacoplamento) dos poços no modelo de uma banda e também para modelo Kane de oito bandas. Para liga semicondutora $InAs/GaSb/InAs$ o *splitting* de energia é bem maior que na liga semicondutora anterior e, percebe uma grande diferença energética entre o $+60\text{\AA}$, para esta mesma liga semicondutora, o comportamento entre o modelo de oito bandas e modelo de uma banda evolui de maneira similar, com a diferença que o *splitting* de energia, entre o nível simétrico e antissimétrico, é menor que no caso de largura do poço com largura de 40\AA . Tudo leva a crer que a diferença observada depende dos efeitos de tunelamento que tender ser mais pronunciado em poços mais estreitos

A função de onda de um poço quântico duplo, na aproximação de banda plana $v(z)=0$ (SHAM; NAKAYAMA, 1979) utilizando o modelo de Kane de oito bandas. Será mostrado a seguir. Esta aproximação dá conta da interação spin-órbita, Esta etapa de trabalho de pesquisa tende por efeito entender o efeito das interfaces no cálculo da anisotropia equação (2.94), e observar, de maneira, detalhada, o efeito do acoplamento e desacoplamento entre os poços quânticos. No gráfico (3D *waterfall*) pode-se ser observado efeito de acoplamento e desacoplamento dos poços pela função de onda em função da distância. Este gráfico mostra os limites para os dois casos: primeiro, quando os poços estão desacoplados, isto é para uma largura de barreira (16 nm), poços quânticos já se encontram totalmente desacoplados. O resultado são duas funções de onda separadas no espaço representando, duas diferentes funções de onda de um poço quântico de largura a , no outro caso limite, quando um acoplamento é máximo caso a largura da barreira ($b \rightarrow 0$), tem-se como resultado da função de onda de um poço quântico duplo de largura $2a$. Como mostra o perfil da banda de condução (ver figura xxxxxx), o autovalor de energia ε_0 e as funções de onda para os estados fundamentais do poço quântico (DQW), com largura de barreira $b = 0nm, b = 2nm$ e $b = 4nm$ e largura do poço fixada em $a = 4nm$. O gráfico permite estimar os valores da função de onda nas diferentes interfaces e, como mudam estes com o acoplamento e o desacoplamento dos poços quânticos. Estes valores são de grande importância para o modelo teórico desenvolvido, permitem calcular anisotropia.

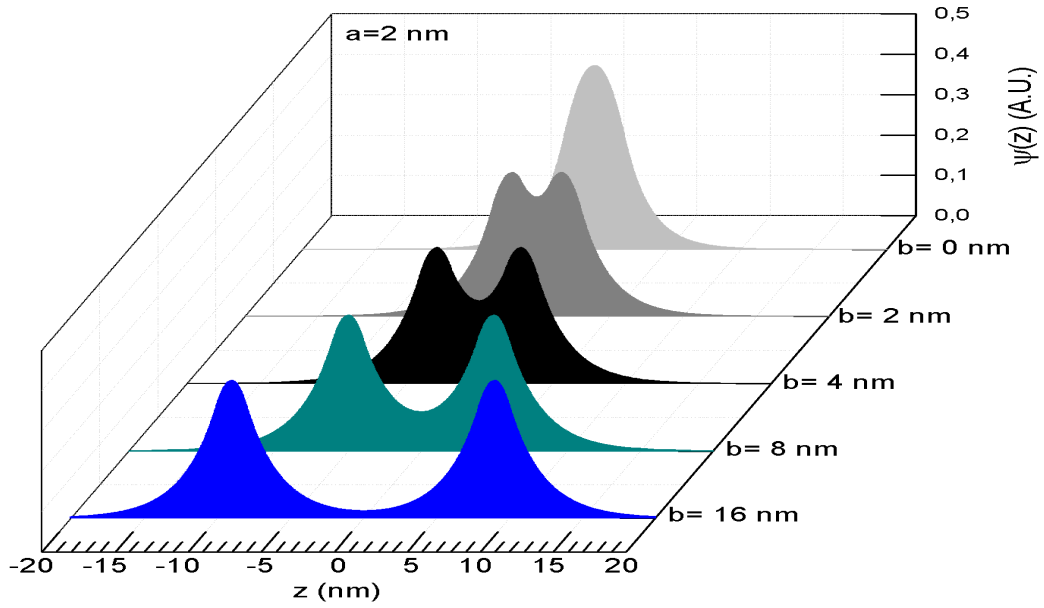


Figura 3.6 - evolução da função de onda do nível base simétrico com diferentes largura de barreira central, para um poço quântico duplo simétrico com poços de largura $a=2$ nm e barreiras barreiras de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$, $m_w^* = 0.067m_e$, $E_g^w = 1.52$ eV, $\Delta^w = 0.34$ eV, $\delta g_{rem}^w = -0.50$, $E_g^b = 1.94$ eV, $\Delta^b = 0.32$ eV, $\delta g_{rem}^b = 0.13$ e $v_0 = 0.277$ eV.

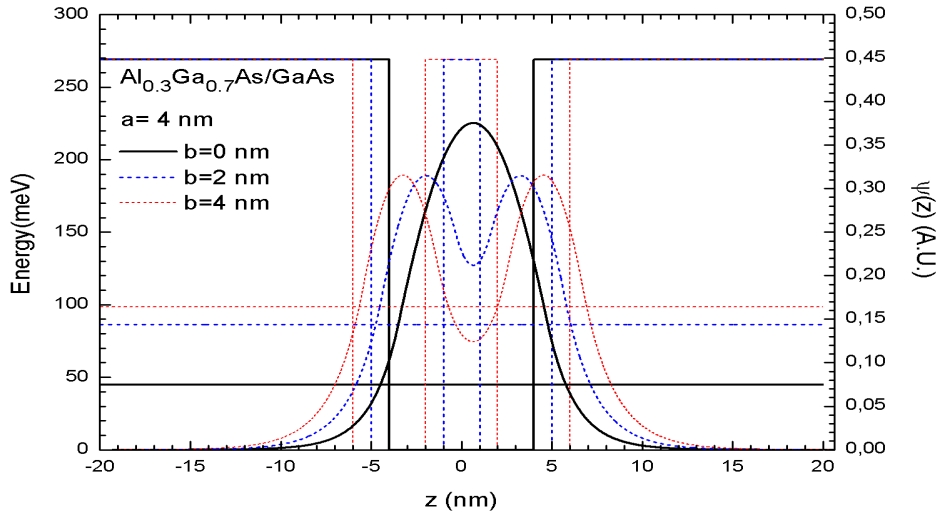


Figura 3.7 - função envelope do estado base do DQW, para três diferentes larguras de barreira central $b=0$ nm, $b=2$ nm, $b=4$ nm com poços de GaAs de largura $a=4$ nm e barreiras de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$, $m_w^* = 0.067m_e$, $E_g^w = 1.52$ eV, $\Delta^w = 0.34$ eV, $\delta g_{rem}^w = -0.50$, $E_g^b = 1.94$ eV, $\Delta^b = 0.32$ eV, $\delta g_{rem}^b = 0.13$ e $v_0 = 0.277$ eV.

as figuras (3.8,3.9,3.10) mostram os resultados para anisotropia do fator g efetivo das ligas InAs e GaSb, em função da largura do poço para diferentes larguras de barreira. Os parâmetros utilizados foram: $m^* = 0.023$, $E_g = 0.418$ eV, $\Delta = 0.38$ eV e $\delta g_{rem} = -0.5$ para o InAs e $m^* = 0.041$, $E_g = 0.81$ eV, $\Delta = 0.76$ eV e $\delta g_{rem} = -2.2$ para o GaSb. Esses são materiais de particular interesse neste trabalho de investigação, pois possibilitam a produção de interfaces do tipo InAs/GaSb com propriedades especiais bem conhecidas, como, por exemplo, um *offset* (v_0) largo para a banda de condução (em torno de 0.96 eV).

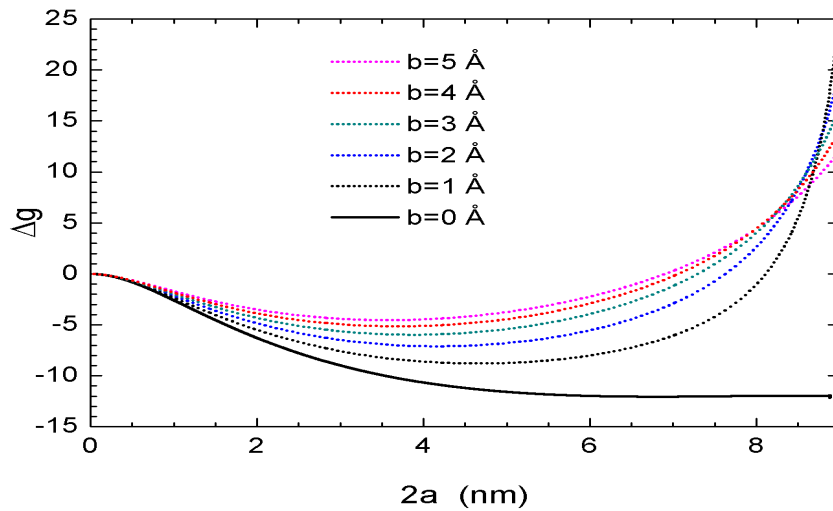


Figura 3.8 - Anisotropia para diferentes pequenas larguras da barreira central, em função da largura do poço para InAs/GaSb.

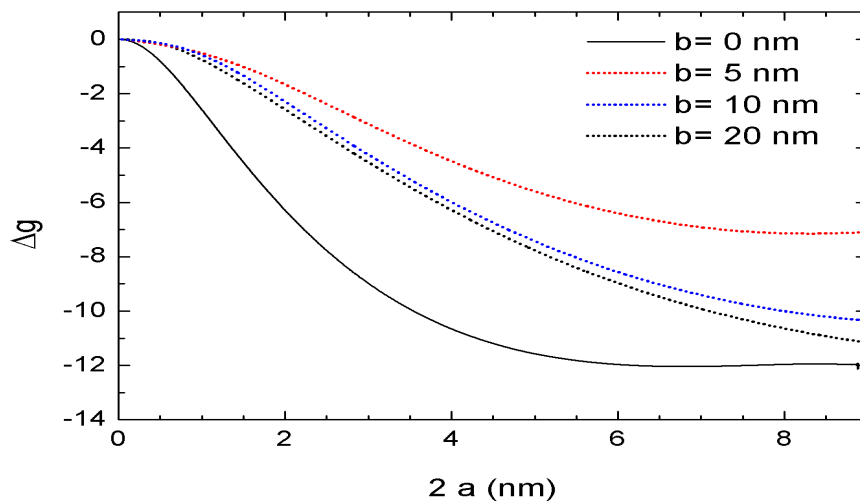


Figura 3.9 - Anisotropia para diferentes larguras da barreira central, em função da largura do poço para InAs/GaSb.

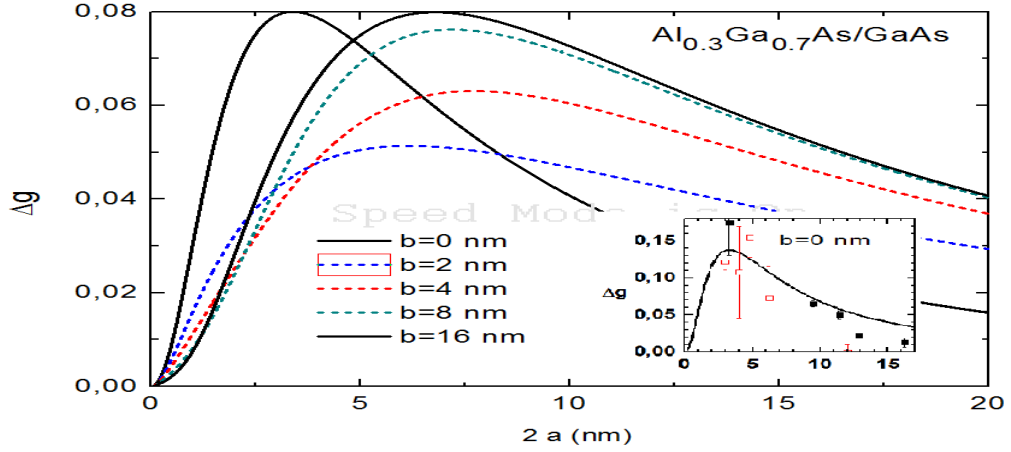


Figura 3.10 - Anisotropia para diferentes larguras da barreira central, em função da largura do poço, para seguintes parâmetros: $m_w^* = 0.067m_e$, $E_g^w = 1.52$ eV, $\Delta^w = 0.34$ eV, $\delta g_{rem}^w = -0.50$, $E_g^b = 1.94$ eV, $\Delta^b = 0.32$ eV, $\delta g_{rem}^b = 0.13$ e $v_0 = 0.277$ eV, o painel menor mostra anisotropia para poço quântico de largura a Obtida no modelo teórico obtido por (SANDOVAL et al., 2013) comparado com os dados experimentais (JEUNE et al., 1997)(símbolos em vermelho)e ((MALINOWSKI; HARLEY, 2000)) símbolos em preto.

Nas figuras (3.8,3.9,3.10) que representa a anisotropia observa-se que no limite, em que a largura da barreira $b \rightarrow 0$, a equação (Equação . 2.94) que determina a anisotropia do fator g de spin para o poço quântico duplo simétrico, assume a mesma forma da expressão para o poço quântico simples de largura $2a$, de fato, com $b = 0$ na equação na (Equação. 2.94) tem-se

$$\Delta g (b \rightarrow 0) = 2 \left(\frac{4m_e}{\hbar^2} \right) a |\psi_1^2(a)| (\eta_w - \eta_b). \quad (3.1)$$

Levando-se em conta a simetria do perfil de confinamento para obter a anisotropia de um poço quântico de largura a, substituese ($a \rightarrow a/2$), que é anisotropia teórica pelo o trabalho (SANDOVAL et al., 2013)

$$\Delta g (b \rightarrow 0) = \left(\frac{4m_e}{\hbar^2} \right) a \left| \psi_1^2\left(\frac{a}{2}\right) \right| (\eta_w - \eta_b) \quad (3.2)$$

Observa-se os resultados para o caso de anisotropia de um poço simples, isto fazendo que largura de a barreira igual zero, em acordo com o trabalho teórico (SANDOVAL et al., 2013) dado por a equação (3.2), em nosso modelo si colocamos a largura da barreira $b = 0$, temos anisotropia de um poço quântico simples de largura $2a$, mostrando a concordância dados experimentais (JEUNE et al., 1997),(MALINOWSKI; HARLEY, 2000), é fácil analisar a dependência da anisotropia com os valores da função de onda nas diferentes interfaces da heteroestrutura, para o caso do poço duplo, tem-se três contribuições: que corresponde a contribuição da função de onda sobre anisotropia do poço duplo equação (2.94) nas diferentes interfaces

4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Em virtude da revolução promovida no desenvolvimento de nanodispositivos (FERT, 2008), a spintrônica é um dos temas que despertam grande interesse no atual cenário da Física. Nesse novo campo de pesquisas, benefícios em setores críticos da tecnologia de informação estão atrelados à compreensão de aspectos básicos da física quântica e, em particular, do spin dos portadores em sistemas que podem ser estruturados com precisão em escala nanométrica. Em tal contexto, a produção das amostras de alta qualidade, visando o desenvolvimento de novos dispositivos, agrega enorme valor ao estudo das nanoestruturas. Particularmente, no campo da spintrônica, sabe-se, por exemplo, que os efeitos de interferência decorrentes da superposição de termos oriundos da interação spin-órbita para elétrons confinados em poços quânticos constituídos por ligas entre semicondutores dos grupos III e V, são de grande importância para o desenvolvimento de dispositivos como transistores e filtros de spin (ZUTIC et al., 2004), além de estabelecerem os alicerces sobre os quais se fundamenta a chamada engenharia do fator g de spin (KOSAKA et al., 2001). Assim, a compreensão de aspectos relativos ao grau de liberdade interno dos elétrons desperta interesses que estão além do ponto de vista da física básica, motivando ambiciosas perspectivas do ponto de vista de suas aplicações tecnológicas (AWSCHALOM et al., 2002).

Nesta dissertação, nós desenvolvemos um estudo teórico sobre o fator g de spin e sua anisotropia para elétrons confinados em poços quânticos duplos, considerando, em particular, o efeito de acoplamento entre poços quânticos separados por uma barreira de potencial. Inicialmente, obtivemos a energia e a função de onda para o estado fundamental. Em seguida, utilizando teoria de perturbação de primeira ordem, obtivemos o fator g de spin considerando duas configurações específicas que o campo magnético externo pode assumir em relação à geometria da heteroestrutura, isto é, perpendicular e paralela à interface. Nossos resultados mostram que, de maneira geral, poços quânticos compostos por ligas semicondutoras com um menor *gap* de energia, apresentam uma anisotropia giromagnética amplificada. Expressões analíticas mostram que o sinal da anisotropia depende da diferença entre os parâmetros de acoplamento spin-órbita associados às diferentes ligas que constituem as heterointerfaces, de forma que a anisotropia obtida para poços quânticos compostos por interfaces do tipo AlGaAs/GaAs apresenta um sinal oposto ao da anisotropia obtida para poços com interfaces do tipo GaSb/InAs. Nossos resultados também mostram que, para poços quânticos duplos, a anisotropia alcança seu máximo valor no limite em que os poços quânticos deixam de interagir, sendo que o valor máximo da anisotropia obtida para poços quânticos simples fixa um limite superior para a anisotropia obtida para poços quânticos duplos, com a diferença de que esses pontos de máximo, no caso de poços simples e poços duplos, ocorrem para distintos valores da largura dos poços.

Analisando as perspectivas com relação ao trabalho aqui desenvolvido, ainda tendo como foco de estudo os poços quânticos acoplados e, em particular, o estudo da anisotropia associada ao fator g efetivo, a influência da simetria do potencial de confinamento pode ser explorada, considerando a dependência da anisotropia com o centro da órbita ciclotrônica. Conforme discutido nesta tese, o formalismo baseado na teoria de perturbação de primeira ordem com o qual obtivemos a anisotropia giromagnética para poços quânticos acoplados, pode ser estendido ao caso das superredes semicondutoras, considerando os efeitos decorrentes da periodicidade característica desse tipo de sistema. Importante ressaltar também que a abordagem aqui utilizada restringe nossos resultados ao limite de campo magnético baixo e permite tratar apenas de heteroestruturas na aproximação de banda plana. Assim, dentre as perspectivas, incluímos também a possibilidade de transpor essas limitações por meio da solução numérica da equação (2.87), com o intuito de estudarmos a dependência da anisotropia giromagnética com o módulo do campo magnético externo, com a densidade eletrônica superficial e a autoconsistência do potencial de confinamento.

5 APÊNDICE

5.1 APÊNDICE A

CLEBSCH GORDAN COEFFICIENTS

36. CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND d FUNCTIONS

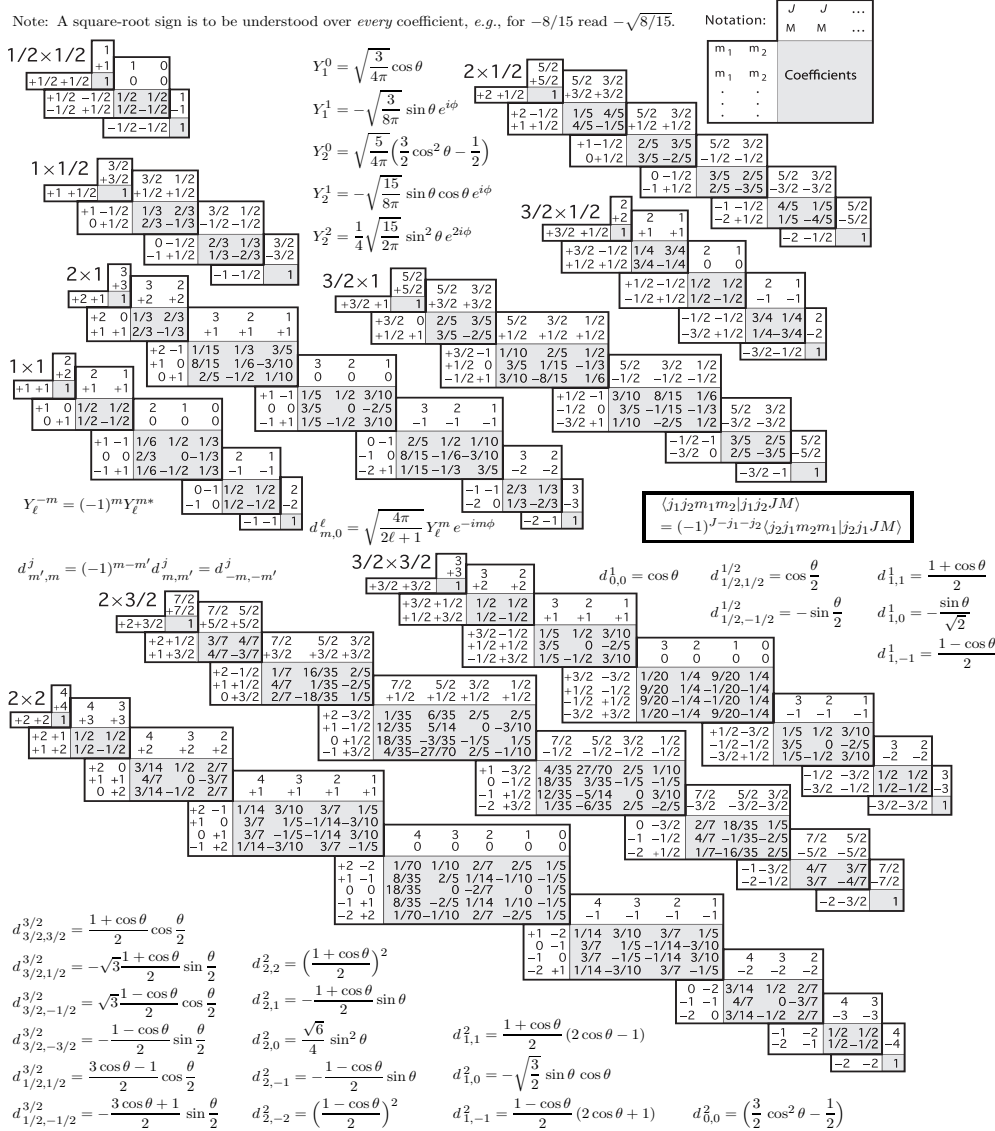


Figure 36.1: The sign convention is that of Wigner (*Group Theory*, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (*The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press, New York, 1953), Rose (*Elementary Theory of Angular Momentum*, Wiley, New York, 1957), and Cohen (*Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients*, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974).

5.2 APÊNDICE B

Na ausência de spin aparte periódica da função de Bloch para a banda de condução é uma função do tipo s, similar ao do orbital atômico, denotado por $|\mathbf{S}\rangle$. Esta função nos indica que a função de Bloch tem propriedades de simetria de um orbital de momento angular $l = 0$, as funções de Bloch na banda de Valência, tem propriedades de orbital de momento angular $l = 1$, e são denotados por $|\mathbf{X}\rangle, |\mathbf{Y}\rangle, |\mathbf{Z}\rangle$, em analogia com as orbitais atômicas figura de embaixo, o hamiltoniano de interação spin-órbita é diagonal na base $|j, j_z\rangle$, portanto. Transformando o hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para esta base, a perturbação spin-órbita é acrescentada somente para os termos da diagonal esta transformação pode ser feita usando os harmônicos esféricos

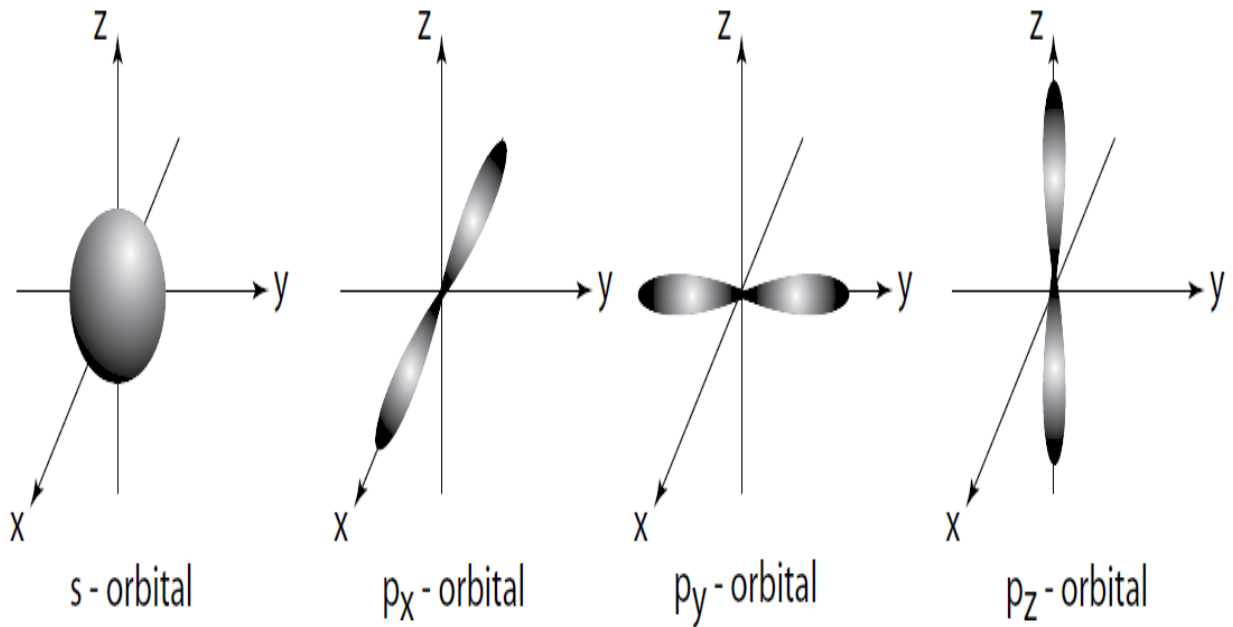


Figura 5.1 - Orbitais p, s de sistemas atômicos. O orbital s é esférico e, portanto, tem simétrica ao longo de todos os eixos; os orbitais p são antissimétricos ao longo da direção que são orientados

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(l - |m|)!}{(l + |m|)!}} (-1)^{(m+|m|)/2} P_{\ell}^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (5.1)$$

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin\theta d\varphi = \delta_{m,m'} \delta_{\ell,\ell'} \quad (5.2)$$

l=0 (órbita s)

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \equiv |\mathbf{S}\rangle \quad (5.3)$$

l=1 (orbital p)

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \equiv |\mathbf{Z}\rangle \quad (5.4)$$

$$Y_{1\pm}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x \pm iy}{r} \equiv \mp \frac{1}{\sqrt{2}} |\mathbf{X} \pm i\mathbf{Y}\rangle \quad (5.5)$$

para mudar de base $|l_z, s_z\rangle$ para a base diagonal $|j, j_z\rangle$ precisa-se dos coeficientes de Clebs Gordon ¹ $|j, j_z\rangle = \sum C |l_z, s_z\rangle$ a continuação apresenta-se dos exemplos representativos; onde usamos os coeficientes de Clebs Gordon para calcular a relação entre as duas bases

$$|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |1, -\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |0, \frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}} \frac{X+iY}{\sqrt{2}} \downarrow + \sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow \quad (5.6)$$

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |1, -\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |0, \frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{X+iY}{\sqrt{2}} \downarrow - \sqrt{\frac{1}{3}} Z \uparrow \quad (5.7)$$

na Tab. 5.1 mostramos os vetores das duas bases

Tabela 5.1 - base diagonal $H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}^{8\times 8}$

$ \mathbf{l}_z, \mathbf{s}_z\rangle$	$ \mathbf{j}, \mathbf{j}_z\rangle$	$E_i(k=0)$	banda
$ 0, \frac{1}{2}\rangle = S \uparrow$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = S \uparrow$	0	Γ_6
$ 0, \frac{1}{2}\rangle = S \downarrow$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = S \downarrow$	0	Γ_6
$ 1, \frac{1}{2}\rangle = -\frac{X+iY}{\sqrt{2}} \uparrow$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = -\frac{X+iY}{\sqrt{2}} \uparrow$	$-E_g$	Γ_8
$ 0, \frac{1}{2}\rangle = Z \uparrow$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{X+iY}{\sqrt{2}} \downarrow + \sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow$	$-E_g$	Γ_8
$ -1, \frac{1}{2}\rangle = \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{X+iY}{\sqrt{2}} \downarrow - \sqrt{\frac{1}{3}} Z \uparrow$	$-E_g - \Delta$	Γ_7
$ 1, -\frac{1}{2}\rangle = -\frac{X+iY}{\sqrt{2}} \downarrow$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow + \sqrt{\frac{2}{3}} Z \downarrow$	$-E_g$	Γ_8
$ 0, -\frac{1}{2}\rangle = Z \downarrow$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow + \sqrt{\frac{1}{3}} Z \downarrow$	$-E_g - \Delta$	Γ_7
$ -1, -\frac{1}{2}\rangle = \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \downarrow$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle = \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \downarrow$	$-E_g$	Γ_8

¹ver tabela apêndice A

Para o estudo de algumas propriedades físicas em nanoestruturas semicondutoras, a aplicação de campos externos é de grande importância, como é sabido a escolha de uma determinada base não deve alterar nosso sistema físico, e por isso que na literatura encontramos diferentes bases que funcionam dependendo da escolha do eixo de quantização do spin e a direção do campo magnético aplicado; Portanto, uma base que simplifica os cálculos quando aplica-se o campo magnético paralelo a direção de crescimento, além que elimina muitos elementos de matriz, foi utilizada por Bastard (*BASTARD, 1988*) considerando os seguintes parâmetros $P = -i\frac{\hbar}{m}\langle s|p|j\rangle$, onde $k_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(k_x \pm ik_y)$

Tabela 5.2 - base diagonal para $H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{8\times 8}$ (*BASTARD, 1988*)

\bar{u}_i	$ \mathbf{j}, \mathbf{j}_z\rangle$	$E_i(k=0)$
$\bar{u}_1 = iS \uparrow$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = CB \uparrow\rangle$	0
$\bar{u}_5 = iS \downarrow$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = CB \downarrow\rangle$	0
$\bar{u}_2 = \frac{X-iY}{\sqrt{6}} \downarrow - \sqrt{\frac{2}{3}}Z \uparrow$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = LH \uparrow\rangle$	$-E_g$
$\bar{u}_6 = -\frac{X-iY}{\sqrt{6}} \uparrow - \sqrt{\frac{2}{3}}Z \downarrow$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = LH \downarrow\rangle$	$-E_g$
$\bar{u}_3 = \frac{X+iY}{\sqrt{2}} \uparrow$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = HH \uparrow\rangle$	$-E_g$
$\bar{u}_7 = \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \downarrow$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle = HH \downarrow\rangle$	$-E_g$
$\bar{u}_4 = \frac{X+iY}{\sqrt{6}} \downarrow - \sqrt{\frac{1}{3}}Z \uparrow$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = SO \uparrow\rangle$	$-E_g - \Delta$
$\bar{u}_8 = -\frac{X-iY}{\sqrt{6}} \uparrow - \sqrt{\frac{1}{3}}Z \downarrow$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = SO \downarrow\rangle$	$-E_g - \Delta$

usando a base mostrada na Tabela anterior calculamos os elementos de matriz $(H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{8\times 8})_{u_i u'_i} = \langle u_i, \sigma_z | (H_0 + H_{so} + (\hbar/m_e)\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}^{(op)}) | u'_i, \sigma'_z \rangle$. mostrados na Tab. 5.3. na próxima página tomando um elemento $(H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{8\times 8})_{u_i u'_i} = \langle u_i, \sigma_z | (\hbar/m_e)\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u'_i, \sigma'_z \rangle$.

$$\frac{\hbar}{m} \vec{k} \left\langle \mathbf{iS} \uparrow \left| \vec{p} \right| \frac{X-iY}{\sqrt{6}} \downarrow - \sqrt{\frac{2}{3}}Z \uparrow \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} p k_z \quad (5.8)$$

Tabela 5.3 - Representação matricial $H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{8 \times 8}$ obtida na base $\{|\bar{u}_i, \sigma_z\rangle\}$.

	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle \uparrow$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ iS\rangle \downarrow$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\langle iS \uparrow \uparrow$	E_c	$-\sqrt{\frac{2}{3}}pk_z$	pk_+	$\sqrt{\frac{1}{3}}pk_z$	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}pk_-$	0
$\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \uparrow \uparrow$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}pk_z$	E_v	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}pk_-$	0	0	0
$\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \uparrow \uparrow$	pk_-	0	E_v	0	0	0	0
$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \uparrow \uparrow$	$\dots\dots\sqrt{\frac{1}{3}}pk_z$	0	$E_v - \Delta$	$\sqrt{\frac{2}{3}}pk_-$	0	0	0
$\langle iS \downarrow \downarrow$	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}pk_+$	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}pk_+$	E_c	$-\sqrt{\frac{2}{3}}pk_z$	pk_-
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \downarrow \downarrow$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}pk_+$	0	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}pk_z$	E_v	0	0
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \downarrow \downarrow$	0	0	0	pk_+	0	E_v	0
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \downarrow \downarrow$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}pk_+$	0	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}pk_z$	0	0	$E_v - \Delta$

Tabela 5.4 - base diagonal para $H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{8 \times 8}$ (SILVA, 1992)

u_i	$ \mathbf{j}, \mathbf{j}_z\rangle$	$E_i(k=0)$
$u_1 = S \uparrow$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	0
$\bar{u}_5 = -S \downarrow$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	0
$\bar{u}_2 = \sqrt{\frac{2}{3}}Z \uparrow + \frac{1}{\sqrt{6}}(iX \uparrow + Y \downarrow)$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$-E_g$
$\bar{u}_6 = -\sqrt{\frac{2}{3}}Z \downarrow + \frac{1}{\sqrt{6}}(iX \downarrow + Y \uparrow)$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$-E_g$
$\bar{u}_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(-iX \uparrow + Y \downarrow)$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$-E_g$
$\bar{u}_7 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(-iX \downarrow + Y \uparrow)$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$-E_g$
$\bar{u}_4 = -\frac{1}{\sqrt{3}}(Y \uparrow - (Z - iX) \uparrow)$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$-E_g - \Delta$
$\bar{u}_8 = -\frac{1}{\sqrt{3}}(Y \downarrow + (Z + iX) \downarrow)$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$-E_g - \Delta$

Usando a base mostrada na Tabela anterior calculamos o seguinte elementos de matriz $(H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{8 \times 8})_{u_i u'_i} = \langle u_i, \sigma_y | (H_0 + H_{so} + (\hbar/m_e)\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}^{(op)}) | u'_i, \sigma'_y \rangle$. mostrados na Tab. 2.2, para qual tomamos $p = -i\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{\hbar}{m}\langle \mathbf{S} | \vec{p} | \mathbf{j} \rangle$

tomando um elemento $(H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{8 \times 8})_{u_i u'_i} = \langle u_i, \sigma_y | (\hbar/m_e)\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u'_i, \sigma'_y \rangle$.

$$\begin{aligned}
 & \frac{\hbar}{m}\vec{k} \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left| \vec{p} \right| \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{Z} \uparrow + \sqrt{\frac{1}{6}}i\mathbf{X} \uparrow + \mathbf{Y} \downarrow \right\rangle = \\
 & = \frac{\hbar}{m}\vec{k} \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left| \vec{p} \right| \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{Z} \uparrow \right\rangle + \frac{\hbar}{m}\vec{k} \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left| \vec{p} \right| \sqrt{\frac{1}{6}}i\mathbf{X} \uparrow \right\rangle + \frac{\hbar}{m}\vec{k} \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left| \vec{p} \right| \mathbf{Y} \downarrow \right\rangle \\
 & = \frac{\hbar}{m}\sqrt{\frac{2}{3}}k_z \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left| p_z \right| \mathbf{Z} \uparrow \right\rangle + \frac{1}{2}ik_z \frac{\hbar}{m}\sqrt{\frac{2}{3}} \left\langle \mathbf{S} \uparrow \left| p_x \right| \mathbf{X} \uparrow \right\rangle \\
 & = p \left(ik_z - \frac{k_x}{2} \right) \quad (5.9)
 \end{aligned}$$

5.3 APÊNDICE C

Medindo a energia do elétron em relação ao fundo da Banda de condução $E = 0$ na região do poço, $E_c^w = 0$, e $E_c^b = v_0$, enquanto, $E_v^w = 0$ e $E_v^b = v_0 - E_g^b$, definem o perfil da banda de valência, e tomando $g_e = 2$

$$P^2 = P_w^2 = P_b^2 = \frac{\hbar^2}{m_w(0)} \frac{1}{\left[\frac{2}{E_v(z)} + \frac{1}{E_v(z) + \Delta(z)} \right]} \quad (5.10)$$

$$\eta(z, \varepsilon_\sigma) = \frac{P^2}{2} \left[\frac{1}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z)} - \frac{1}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z) + \Delta(z)} \right] \quad (5.11)$$

$$\alpha_R(z, \varepsilon) = \frac{d}{dz} \eta(z, \varepsilon_\sigma) \quad (5.12)$$

$$g^*(z, \varepsilon_\sigma) = g_e - \frac{4m_e}{\hbar^2} \left[\alpha_R(z, \varepsilon_\sigma) (z - z_0) + \eta(z, \varepsilon_\sigma) + \eta_{rem} \right], \quad (5.13)$$

no limite de *bulk* $v = 0$ e tomando as considerações acima que definem o perfil da banda de valência temos

$$g^* = -\frac{4m_e p^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \left[\frac{1}{E + E_g} - \frac{1}{E + E_g - \Delta} \right] + g_e \quad (5.14)$$

$$g^* = -\frac{4m_e p^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \left[\frac{1}{E + E_g} - \frac{1}{E + E_g - \Delta} \right] + 2 = -\frac{2m_e p^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta}{(E_g)(E + E_g)} \right] + 2 \quad (5.15)$$

$$2 \left(1 - \frac{m_e}{m^*} \frac{\Delta}{3E_g + 2\Delta} \right) = 2 - \frac{2m_e p^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \left[\frac{2}{E_g} - \frac{1}{E + E_g - \Delta} \right] = 2 - \frac{2m_e p^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta}{E_g(E + E_g)} \right] \quad (5.16)$$

$$g^* = 2 \left(1 - \frac{m_e}{m^*} \frac{\Delta}{3E_g + 2\Delta} \right) \quad (5.17)$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AWSCHALOM, D.; LOSS, D.; SAMARTH, N. **Semiconductor Spintronics and Quantum Computation**. Berlin: Springer, 2002. 67
- BAIBICH, M. N.; BROTO, J. M.; FERT, A.; DAU, F. N. V.; PETROFF, F.; ETIENNE, P.; CREUZET, G.; FRIEDERICH, A.; CHAZELAS, J. Giant magnetoresistance of (001)fe/(001)cr magnetic superlattices. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 61, p. 2472–2475, Nov 1988. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2472>>. 19
- BASTARD, G. **Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures**. [S.l.]: Les Éditions de Physique, 1988. (Monographies de physique). ISBN 9780470217085. 17, 72
- BENDANIEL, D. J.; DUKE, C. B. Space-charge effects on electron tunneling. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 152, p. 683–692, Dec 1966. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.152.683>>. 24
- BRANSDEN B. H., J. C. J. B. B. H. **Quantum mechanics**. [S.l.]: Prentice Hall. 51
- BROZAK, G.; SILVA, E. A. de Andrada e; SHAM, L. J.; DEROSA, F.; MICELI, P.; SCHWARZ, S. A.; HARBISON, J. P.; FLOREZ, L. T.; ALLEN, S. J. Tunneling cyclotron resonance and the renormalized effective mass in semiconductor barriers. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 64, p. 471–474, Jan 1990. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.64.471>>. 57
- BRUNO-ALFONSO, A.; LÓPEZ, F. E.; RAIGOZA, N.; REYES-GÓMEZ, E. Magnetic-field and confinement effects on the effective landé g factor in alxga1-xas parabolic quantum wells. **The European Physical Journal B**, Springer-Verlag, v. 74, n. 3, p. 319–329, 2010. ISSN 1434-6028. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2010-00091-8>>. 20, 21
- BYCHKOV, Y. A.; RASHBA, E. Oscillatory effects and magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. **J. Phys. C: Solid State Phys.**, v. 17, p. 6039–6045, 1984. 41
- DATTA, S. **Quantum phenomena**. [S.l.]: Addison-Wesley Longman, Incorporated, 1989. (Modular Series on Solid State Devices, Vol 8). ISBN 9780201079562. 19
- DAVIES, J. H. **The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1998. ISBN 9780521484916. 38, 40

DIOS-LEYVA, M. de; REYES-GÓMEZ, E.; PERDOMO-LEIVA, C. A.; OLIVEIRA, L. E. Effects of non-parabolicity and in-plane magnetic fields on the cyclotron effective mass and g_{\perp} -factor in GaAs-(Ga,Al)As quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 73, p. 085316, Feb 2006. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.085316>>. 20, 21

FERT, A. Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 80, p. 1517–1530, Dec 2008. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.1517>>. 19, 67

GERCHIKOV, L. G.; SUBASHIEV, A. V. Spin splitting of size-quantization subbands in asymmetric heterostructures. **Sov. Phys. Semicond.**, v. 26, n. 1, p. 73–78, 1992. 55, 57

HANNAK, R.; OESTREICH, M.; HEBERLE, A.; RÜHLER, W.; KOHLER, K. Electron g factor in quantum wells determined by spin quantum beats. **Solid State Communications**, v. 93, n. 4, p. 313 – 317, 1995. ISSN 0038-1098. Disponível em:

<<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0038109894007837>>. 20

III, T. P. S.; FANG, F. F. g factor of electrons in an InAs quantum well. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 35, p. 7729–7731, May 1987. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.35.7729>>. 20

IVCHENKO, E.; KISELEV, A.; WILLANDER, M. Electronic g factor in biased quantum wells. **Solid State Communications**, v. 102, n. 5, p. 375 – 378, 1997.

Disponível em:

<<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109897000094>>. 20, 21

IVCHENKO, E. L.; KISELEV, A. A. Electron g factor of quantum wells and superlattices. **Sov. Phys. Semicond.**, American Institute of Physics, v. 26, p. 827–831, Aug 1992. 20, 21

JEUNE, P. L.; ROBERT, D.; MARIE, X.; AMAND, T.; BROSSEAU, M.; BARRAU, J.; KALEVCIH, V. Anisotropy of the electron Landé g factor in quantum wells.

Semicond. Sci. Technol., IOP, v. 12, p. 380, 1997. 15, 20, 65

KANE, E. **Handbook on Semiconductors**. [S.l.]: North-Holland Publishing Company, 1982. 30, 43, 57

KIM, N.; ROCCA, G. C. L.; RODRIGUEZ, S. Effect of nonparabolicity on the conduction-electron spin resonance in cubic semiconductors. **Phys. Rev. B**, American

Physical Society, v. 40, p. 3001–3012, Aug 1989. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.40.3001>>. 57

KISELEV, A. A.; KIM, K. W.; IVCHENKO, E. L. Zeeman effect in wurtzite-based and strained cubic heterostructures. **physica status solidi (b)**, v. 215, p. 235–239, 1999.

20, 21

KOSAKA, H.; KISELEV, A.; BARON, F.; KIM, K. W.; YABLONOVITCH, E. Electron g factor engineering in iii-v semiconductors for quantum communications. **Electronic Letters**, Institution of Engineering and Technology, v. 37, n. 7, p. 464–465, 2001. 67

KOTLYAR, R.; REINECKE, T. L.; BAYER, M.; FORCHEL, A. Zeeman spin splittings in semiconductor nanostructures. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 63, p. 085310, Feb 2001. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.085310>>. 20, 21

KRONIG, R. de L.; PENNEY, W. G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 130, n. 814, p. 499–513, 1931. ISSN 0950-1207. 59

LUSAKOWSKI, A.; WRÓBEL, J.; DIETL, T. Effect of bulk inversion asymmetry on the datta-das transistor. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 68, p. 081201, Aug 2003. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.081201>>. 19

LUTTINGER, J. M.; KOHN, W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 97, p. 869–883, Feb 1955. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.97.869>>. 30, 50

MALINOWSKI, A.; HARLEY, R. T. Anisotropy of the electron g factor in lattice-matched and strained-layer iii-v quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 62, p. 2051–2056, Jul 2000. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.62.2051>>. 15, 20, 65

MARQUES, G. E.; SHAM, L. J. Theory of space-charge layers in narrow-gap semiconductors. **Surf. Sci.**, v. 113, p. 131–136, 1982. 55

PFEFFER, P.; ZAWADZKI, W. Anisotropy of spin g factor in GaAs $_{1-x}$ Al $_x$ As symmetric quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 74, p. 233303, Dec 2006. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.233303>>. 20, 21

ROTH, L. M.; LAX, B.; ZWERDLING, S. Theory of optical magneto-absorption effects in semiconductors. **Physical Review**, APS, v. 114, p. 90, 1959. 57

SANDOVAL, M. A. T.; SILVA, A. Ferreira da; SILVA, E. A. de Andrada e; ROCCA, G. C. L. Mesoscopic spin-orbit effect in the semiconductor nanostructure electron g factor. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 86, p. 195302, Nov 2012.

Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.195302>>. 13, 21

_____. Spin-orbit interaction strength and anisotropy in iii-v semiconductor heterojunctions. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 87, p. 081304, Feb 2013.

Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.081304>>. 15, 65

SANDOVAL, M. A. toloza. **Fenômenos dependentes de spin em semicondutores nanoestruturados**. Tese (Doutorado) — Universidad Federal da Bahia, UFBA, Abril 2014. 13, 21, 40

SCHLIEMANN, J.; EGUES, J. C.; LOSS, D. Nonballistic spin-field-effect transistor.

Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 90, p. 146801, Apr 2003. Disponível

em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.146801>>. 19

SHAM, L. J.; NAKAYAMA, M. Effective-mass approximation in the presence of an interface. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 20, p. 734–747, Jul 1979.

Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.20.734>>. 50, 62

SILVA, E. A. de Andrada e. Conduction-subband anisotropic spin splitting in iii-v semiconductor heterojunctions. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 46, p. 1921–1924, Jul 1992. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.46.1921>>. 17, 46, 74

SILVA, E. A. de Andrada e; ROCCA, G. C. L.; BASSANI, F. Spin-split subbands and magneto-oscillations in iii-v asymmetric heterostructures. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 50, p. 8523–8533, Sep 1994. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.8523>>. 55, 57

_____. Spin-orbit splitting of electronic states in semiconductor asymmetric quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 55, p. 16293–16299, Jun 1997.

Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.55.16293>>. 57

SIRENKO, A. A.; RUF, T.; CARDONA, M.; YAKOVLEV, D. R.; OSSAU, W.; WAAG, A.; LANDWEHR, G. Electron and hole g factors measured by spin-flip raman scattering in cdte/cd_{1-x}mg_xte single quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 56, p. 2114–2119, Jul 1997. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.56.2114>>. 20

SNELLING, M. J.; FLINN, G. P.; PLAUT, A. S.; HARLEY, R. T.; TROPPER, A. C.; ECCLESTON, R.; PHILLIPS, C. C. Magnetic g factor of electrons in $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 44, p. 11345–11352, Nov 1991. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.44.11345>>. 20

STRINGFELLOW, G. B. **Organometallic vapor-phase epitaxy: theory and practice**. [S.l.]: Academic Press, 1999. 22

TEHRANI, S.; CHEN, E.; DURLAM, M.; DEHERRERA, M.; SLAUGHTER, J. M.; SHI, J.; KERSZYKOWSKI, G. High density submicron magnetoresistive random access memory (invited). **Journal of Applied Physics**, v. 85, n. 8, 1999. 19

TING, D.-Y.; CARTOIXA, X. Resonant interband tunneling spin filter. **Appl. Phys. Lett.**, v. 81, p. 4198–4200, 2002. 19

TOMIMOTO, S.; NOZAWA, S.; TERAJ, Y.; KURODA, S.; TAKITA, K.; MASUMOTO, Y. Anisotropic spin dynamics of confined electrons in CdTe/ZnTe quantum structures. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 81, p. 125313, Mar 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.125313>>. 20

TOMONAGA, S. **The Story of Spin**. [S.l.]: University of Chicago Press, 1997. (A Pacific Basin Institute book). ISBN 9780226807942. 41

TSAO, J. Y. **Materials fundamentals of molecular beam epitaxy**. [S.l.]: Academic Press, 2012. 22

WINKLER, R. **Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems**. [S.l.]: Springer, 2003. (Physics and Astronomy Online Library, N° 191). ISBN 9783540011873. 14, 50

WOLF, S. A.; CHTCHELKANOVA, A. Y.; TREGGER, D. M. Spintronics - a retrospective and perspective. **IBM Journal of Research and Development**, v. 50, n. 1, p. 101–110, 2006. 20

YU, P.; CARDONA, M. **Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties**. [S.l.]: Springer, 1996. ISBN 9783540583073. 17, 37

ZHANG, X. C.; ORTNER, K.; PFEUFFER-JESCHKE, A.; BECKER, C. R.; LANDWEHR, G. Effective g factor of n -type $\text{HgTe}/\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ single quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 69, p. 115340, Mar 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.115340>>. 20

ZHAO, Q. X.; OESTREICH, M.; MAGNEA, N. Electron and hole g-factors in cdte/cdmgte quantum wells. **Applied Physics Letters**, AIP, v. 69, n. 24, p. 3704–3706, 1996. Disponível em: <<http://link.aip.org/link/?APL/69/3704/1>>. 20

ZUTIC, I.; FABIAN, J.; SARMA, S. D. Spintronics: Fundamentals and applications. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 76, p. 323–410, Apr 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.76.323>>. 19, 67