



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

INSTITUTO DE FÍSICA

**FENÔMENOS DEPENDENTES DE SPIN  
EM SEMICONDUTORES NANOESTRUTURADOS**

Marcelo Alejandro Toloza Sandoval

Tese 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 Prof. Dr. Erasmo Assumpção de Andrada e Silva, aprovada em 28 de maio de 2014 como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Salvador

2014





UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

INSTITUTO DE FÍSICA

**FENÔMENOS DEPENDENTES DE SPIN  
EM SEMICONDUTORES NANOESTRUTURADOS**

Marcelo Alejandro Toloza Sandoval

Tese 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 Prof. Dr. Erasmo Assumpção de Andrada e Silva, aprovada em 28 de maio de 2014 como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Salvador

2014

Sandoval, Marcelo Alejandro Toloza

FENÔMENOS DEPENDENTES DE SPIN EM SEMI-  
CONDUTORES NANOESTRUTURADOS. Salvador, 2014.

Orientador: Antonio Ferreira da Silva

Coorientador: Erasmo Assumpção de Andrada e Silva

Tese (Doutorado em Física / Programa de Pós-Graduação  
em Física). Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia.

1. Fator  $g$  de Spin. 2. Interação Spin-Órbita. 3. Efeito Zeeman.  
4. Efeito Rashba. 5. Efeito Dresselhaus. 6. Spintrônica.

*A meus pais, em honra, com amor e gratidão.*



## AGRADECIMENTOS

Supondo que os momentos mais significativos de nossas vidas se estabeleçam a par da necessidade de superação das fatalidades do destino, parece natural que, diante de nossas maiores conquistas, deixemos os nossos maiores sacrifícios. Do ponto de vista pessoal, posso dizer que a conclusão deste trabalho relegou-me anos de amparo e convívio em família, e que palavras não dariam a ideia dos sentimentos de solidão e distância causados, ao longo dos anos, pela ausência da experiência cotidiana familiar. Em contrapartida, meus familiares me presentearam com o que possuo de mais precioso, uma rica fonte de onde emergem minhas forças, um meio indispensável à realização de minhas mais árduas empreitadas e, também, acima de tudo, uma finalidade natural e nobre ao ponto de vista da efêmera existência de um ser humano, assim como eu sou. A minha família, pelo amor e carinho que me foram dedicados, expresso humildemente a minha mais profunda gratidão.

É inevitável que o enraizamento dos propósitos profissionais em nossas vidas acabe por transformar nossas relações com o mundo, assim, muitos de nossos laços mais estreitos acabam por possuir tanto um caráter pessoal quanto um caráter profissional. Logo, posso dizer que não é pequeno o número de pessoas pelas quais possuo uma enorme gratidão e tantas outras que, indubitavelmente, contribuíram de maneira positiva em minha vida durante o tempo em que desenvolvi este trabalho. Algumas pessoas, no entanto, contribuíram de maneira fundamental para tornar a conclusão deste trabalho possível e, dada, para mim, a sua importância, sinto-me na obrigação de fazer uma menção explícita sobre minha dívida e inestimável gratidão: ao Prof. Dr. Antonio Ferreira da Silva, pela amizade, pela confiança, pela orientação, pela oportunidade que me foi dada de contribuir junto ao desenvolvimento científico e, principalmente, pelo apoio nos momentos críticos, que não foram poucos! Ao Prof. Dr. Erasmo de Andrada e Silva, pela orientação, pela amizade, pela enorme paciência e extremo cuidado com que conduziu a supervisão deste trabalho. Aos amigos com os quais, durante anos, compartilhei minhas mais diversas dificuldades: Nyemer Pivetta, Ildeli Costa, Dehan Poli, Bruno Pianna, Denis Faria, Olívio Faria, Noesa Alves, Zaluarte Faria e Rogério Neves. Ao Prof. Dr. Jailton de Almeida, pela amizade e pelas discussões sempre enriquecedoras; aos Professores do Laboratório de Propriedades Ópticas, pela motivação e incentivo. Meus mais sinceros agradecimentos aos amigos e amigas do Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia (IF-UFBA), aos Professores que muito contribuíram para minha formação acadêmica, aos funcionários do IF-UFBA e também aos colegas do Programa de Pós Graduação em Física, serei sempre muito grato!

Por fim, pelo suporte financeiro que me foi concedido em favor da realização deste trabalho, agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).





*“ (...) a alma que deseja aprender a conhecer,  
pela aventura da experiência mais pessoal,  
os sentimentos de um conquistador ou de um pioneiro do ideal (...) ”*

FRIEDRICH NIETZSCHE,  
em *A Gaia Ciência*.



## RESUMO

Nas últimas três décadas, o desenvolvimento de técnicas de produção de semicondutores estruturados em escala nanométrica permitiu um vertiginoso avanço entre os dispositivos eletrônicos *in solid state*, onde a manipulação ativa sobre o grau de liberdade intrínseco das partículas elementares, conhecido como spin, estabeleceu definitivamente uma nova fronteira para aplicações (FERT, 2008). Em nanoestruturas compostas por semicondutores não-magnéticos, os autoestados permitidos para elétrons podem ter a degenerescência de spin levantada pela influência de um campo magnético externo, como no efeito Zeeman, ou em decorrência da interação spin-órbita associada à quebra da simetria de inversão no espaço promovida pelos potenciais de *bulk* (efeito Dresselhaus) e de confinamento (efeito Rashba). Esses fenômenos formam o núcleo da investigação científica presente nesta tese.

Inicialmente, discutimos algumas das propriedades básicas que caracterizam os sólidos cristalinos (ASHCROFT; MERMIN, 1976) e o modelo de Kane que permite tratar da estrutura eletrônica de ligas semicondutoras do tipo *zinc-blende*, levando em conta o efeito da interação spin-órbita (KANE, 1982). Então, utilizando a aproximação de função envelope (LUTTINGER; KOHN, 1955), consideramos um poço quântico semicondutor, com um perfil de condução, em princípio, arbitrário, na presença de um campo magnético uniforme. Utilizando o calibre de Landau e a substituição fundamental, reformulamos a teoria de massa efetiva para estados eletrônicos considerando a renormalização do fator-g de spin em função do confinamento eletrônico estrutural e apresentamos uma interpretação física simples para a anisotropia giromagnética observada em poços quânticos semicondutores. A geometria do potencial de confinamento exerce um papel determinante sobre os efeitos oriundos da interação spin-órbita, em especial, mostramos que o acoplamento Rashba contribui com dois termos sobre o hamiltoniano efetivo para elétrons, sendo um dos termos finito mesmo para estruturas com simetria de inversão especular (SANDOVAL et al., 2012a).

Exploramos as aplicações do formalismo desenvolvido, em particular, o limite de campo magnético nulo, onde recuperamos a equação de massa efetiva que usualmente descreve o acoplamento Rashba (BYCHKOV; RASHBA, 1984). Discutimos o acoplamento Rashba em gases bidimensionais de elétrons confinados em heterojunções compostas por diferentes ligas semicondutoras, onde propomos, em correspondência à equação de massa efetiva, uma solução variacional dependente de spin (SANDOVAL et al., 2009; SANDOVAL et al., 2011). Obtivemos a relação de dispersão para estados de condução e o decorrente desdobramento Rashba em função do vetor de onda no plano. Também obtivemos o nível de Fermi e a função de onda para o estado fundamental, calculados segundo a aproximação de Hartree. Consideramos a interferência produzida pelo acoplamento Dresselhaus e a modulação da intensidade do acoplamento spin-órbita, de acordo com a orientação cristalográfica, como função da densidade eletrônica superficial, evidenciando a dependência dos resultados obtidos com os parâmetros que caracterizam a heterointerface (SANDOVAL et al., 2013).

Um amplo confronto desenvolvido com resultados experimentais independentes revela, de maneira geral, a aplicabilidade, clareza e acurácia que são características de nosso modelo.



## ABSTRACT

Over the last decades, the development of the semiconductor nanotechnology has provided a drastic improvement to the solid-state devices, where the active manipulation of the intrinsic degree of freedom of the elementary particles, known as spin, redefines the boundaries for the modern information technology ([FERT, 2008](#)). In nonmagnetic semiconductor nanostructures, the electronic eigenstates may have the spin degeneracy lifted by the influence of an external magnetic field, as in the Zeeman effect, or due to the spin-orbit interaction in the lack of the spatial inversion symmetry associated to the microscopic potentials, known as Dresselhaus effect, and to the mesoscopic confinement, known as Rashba effect. All those effects will be investigated along this thesis.

Starting from the basic properties of the crystalline solids ([ASHCROFT; MERMIN, 1976](#)), within the  $8 \times 8 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Kane model for the zinc blende bulk ([KANE, 1982](#)), we take into account the spin-orbit interaction and, in the envelope function approximation ([LUTTINGER; KOHN, 1955](#)), consider a semiconductor quantum well (QW) with a general band-edge profile in the presence of an external magnetic field. Using the Landau gauge and making the fundamental substitution, a new effective mass theory for electronic states is proposed considering the electron g-factor renormalization due to the mesoscopic confinement. It provides a simple physical picture for the g-factor anisotropy observed in semiconductor QWs. The confinement geometry determines the role of the interplay between terms with the same spin-orbit origin, in especial, the Rashba coupling contributes with two terms for electronic states, where one of them survives in despite of the mirror inversion symmetry ([SANDOVAL et al., 2012a](#)).

Exploring the developed framework, is easy to check that our results reduce exactly to the usual Rashba effect in the limit of zero magnetic-field ([BYCHKOV; RASHBA, 1984](#)). So, we investigate the Rashba coupling in two-dimensional electron gases confined in III-V semiconductor heterojunctions, using a spin-dependent variational solution for the corresponding effective mass equation ([SANDOVAL et al., 2009](#); [SANDOVAL et al., 2011](#)). The Fermi level and the ground state wave function are obtained assuming the Hartree approximation. The dispersion relations and Rashba splitting as a function of the in-plane wave vector also are obtained. Adding the Dresselhaus contribution, we consider the spin-orbit interaction strength as a function of the electron density and crystalline orientation, including its explicit dependence on heterointerface parameters ([SANDOVAL et al., 2013](#)).

In general, the comparison between our results and independent measurements reveals the potential utility, the transparency and the accuracy of our theory.



## SUMÁRIO

	<u>Pág.</u>
<b>1 INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>17</b>
<b>2 MODELO DE KANE</b> . . . . .	<b>33</b>
2.1 Alguns conceitos básicos em física da estado sólido . . . . .	33
2.2 Elétrons de Bloch . . . . .	35
2.3 Representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ . . . . .	37
2.4 Modelo de Kane com 3 bandas . . . . .	38
2.5 Efeito da interação spin-órbita . . . . .	42
<b>3 EFEITO ZEEMAN</b> . . . . .	<b>47</b>
3.1 Aproximação de função envelope . . . . .	49
3.2 Massa e fator g efetivos . . . . .	51
3.3 Exemplos . . . . .	53
<b>4 EFEITO RASHBA</b> . . . . .	<b>61</b>
4.1 Massa efetiva no limite de baixas energias . . . . .	62
4.2 Solução variacional dependente de spin . . . . .	67
4.3 Efeito Rashba variacional . . . . .	68
4.4 Energia de Fermi . . . . .	71
4.5 Aproximação de barreira perfeitamente isolante . . . . .	72
<b>5 EFEITO DRESSELHAUS</b> . . . . .	<b>73</b>
5.1 Anisotropia spin-órbita . . . . .	74
5.2 Cálculo das subpopulações . . . . .	78
5.3 Considerações finais . . . . .	79
<b>6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS</b> . . . . .	<b>83</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> . . . . .	<b>87</b>
<b>A - ANEXO: MANUSCRITOS E PUBLICAÇÕES</b> . . . . .	<b>97</b>





# 1 INTRODUÇÃO

Nos últimos cem anos, o conhecimento adquirido a respeito do elétron e de suas propriedades proporcionou o embasamento científico responsável por um avanço tecnológico sem precedentes. Em particular, os transistores, presentes aos milhões nos computadores atualmente utilizados, são dispositivos onde se utiliza o fluxo da carga elétrica, ou seja, a corrente elétrica, como veículo de informação (MALVINO, 1993). Entretanto, outra propriedade do elétron, seu momento de dipolo magnético intrínseco, também chamado de momento de dipolo magnético de spin, agrega novas perspectivas expandindo o domínio das aplicações inicialmente estabelecidas pela eletrônica tradicional (FERT, 2008). Vislumbra-se um novo patamar para o desenvolvimento tecnológico atrelado ao controle dessa propriedade em um material artificialmente produzido para tal fim, onde a manipulação ativa sobre tal grau de liberdade permita sua utilização como unidade básica ao processo de informação, fornecendo assim o suporte necessário ao desenvolvimento de tecnologias revolucionárias, como a spintrônica e a computação quântica (ZUTIC et al., 2004). O desenvolvimento e o aperfeiçoamento de sofisticadas técnicas de crescimento controlado de cristais semicondutores permitiram a produção de toda uma classe de materiais chamados nanoestruturados, em especial, dos sistemas bidimensionais (ANDO et al., 1982). Conhecidos principalmente por sua alta e característica mobilidade eletrônica<sup>1</sup>, os sistemas bidimensionais constituíram, ao longo das últimas décadas, o cenário para algumas das mais importantes descobertas da Física<sup>2</sup> (KLITZING et al., 1980; TSUI et al., 1982). Além da repercussão científica, sob o ponto de vista das aplicações e de uma perspectiva tecnológica, uma ambiciosa proposta veio à tona com a hipótese de um dos dispositivos precursores no campo da spintrônica, o transistor de Datta e Das (DATTA; DAS, 1990). Desde então, propostas de dispositivos spintrônicos vem mobilizando esforços também em setores estratégicos e não apenas entre a comunidade científica<sup>3</sup>; a despeito da série de problemas considerados críticos diagnosticados, avanços significativos foram alcançados e trabalhos recentes dão indícios de que o tão esperado transistor spintrônico encontra-se em um estágio de materialização eminente (KOO et al., 2009; WUNDERLICH et al., 2010).

---

<sup>1</sup>*High Mobility Electron Transistors* (HMETs).

<sup>2</sup>Com o gás bidimensional de elétrons (*2-Dimensional Electron Gas*, conhecido pela acrografia 2DEGs), vieram à luz os modos de quantização da componente transversal da magnetoresistividade, conhecidos como Efeito Hall Quântico Inteiro e Efeito Hall Quântico Fracionário. Descobertas mais recentes incluem o Efeito Hall de Spin (KATO et al., 2004), assim como uma nova classe de materiais conhecidos como isolantes topológicos (KÖNIG et al., 2007), ambos decorrentes das peculiares propriedades de transporte de spin apresentadas pelos 2DEGs, onde é possível induzir uma segregação de portadores por spin sem que esta esteja necessariamente vinculada a uma segregação de carga elétrica.

<sup>3</sup>*Spin Transport Electronics*, ou simplesmente *Spintronics*, é uma expressão que faz referência a um programa, criado pela *United States Defense Advanced Research Projects Agency* (US DARPA), designado ao desenvolvimento de dispositivos essencialmente baseados em propriedades magnéticas apresentadas por determinados materiais (WOLF et al., 2006).

Em meio ao vigoroso avanço tecnológico promovido pelo desenvolvimento dos dispositivos spintrônicos, persistem problemas críticos relacionados aos mecanismos responsáveis pela decoerência da orientação do spin do elétron, presumindo a necessidade para a propagação do elétron, ao longo de uma distância comparável ao comprimento associado ao dispositivo, de que a informação sobre a orientação de seu spin permaneça coerente. Nesse contexto, a produção de amostras com alta qualidade e o decorrente aperfeiçoamento da tecnologia *in solid state* vem agregando enorme valor ao estudo dos sistemas de baixa dimensionalidade, entre os quais, as nanoestruturas compostas por semicondutores não magnéticos tem recebido especial atenção ao acenar com a possibilidade de aplicações complementares àquelas consolidadas pela eletrônica tradicional (AWSCHALOM; SAMARTH, 2009). Amplamente discutidos (BASTARD, 1988; DAVIES, 1998; HARRISON, 2005), poços, fios e pontos quânticos podem armazenar uma quantidade variável de elétrons, confinando-os, respectivamente, em duas, uma e zero dimensões. Em tais circunstâncias, os estados permitidos para elétrons podem ter a degenerescência de spin levantada pela influência de um campo magnético externo<sup>4</sup>, o conhecido efeito Zeeman<sup>5</sup>, ou mesmo em decorrência do acoplamento spin-órbita (SO), o qual geralmente tem seu efeito associado à estruturas sem centro de inversão no espaço, como no caso dos efeitos Dresselhaus (DRESSELHAUS, 1955) e Rashba (BYCHKOV; RASHBA, 1984), onde os potenciais de *bulk* (em nível microscópico) e de confinamento (em nível mesoscópico) manifestam-se sobre os estados de condução, por meio de uma transformação de Lorentz, à semelhança de um campo magnético cuja intensidade depende da direção cristalina (SILVA, 1992; WINKLER, 2004). O vetor momento de dipolo magnético de spin, associado ao elétron, precessiona, então, em torno do campo magnético em questão. Como a interação SO acopla o spin do elétron ao seu movimento orbital, os mecanismos de espalhamento responsáveis pela relaxação do momento linear eletrônico podem ocasionar um movimento de precessão significativamente defasado e, por conseguinte, levar a perda da informação sobre a orientação do spin. É de grande interesse conhecer quais materiais favorecem a modulação do acoplamento SO considerando sua anisotropia, com a possibilidade da supressão de um importante mecanismo de decoerência (DYAKONOV; PEREL, 1971), na peculiar situação para qual a intensidade do acoplamento SO tende a zero, conforme observado recentemente (KORALEK et al., 2009)

---

<sup>4</sup>Em nanoestruturas compostas por semicondutores não-magnéticos, com a influência de um campo magnético externo, o chamado tempo de relaxação de spin pode alcançar uma ordem de grandeza muito superior àquela para a qual a dinâmica orbital eletrônica permanece coerente; à temperatura ambiente, quando a precessão de spin alcança milhares de ciclos, o tempo de relaxação de spin pode chegar à ordem de nanosegundos (KIKKAWA et al., 1997).

<sup>5</sup>Referimo-nos ao efeito Zeeman anômalo, o qual, a despeito da terminologia utilizada, é o mais discutido na literatura. Contrário ao que ocorre no efeito Zeeman normal (basicamente causado pela interação de um campo magnético externo com o momento magnético orbital de elétrons opticamente ativos), veremos que o efeito Zeeman anômalo só pode ser explicado se assumimos que o elétron possui um momento de dipolo magnético intrínseco, evidentemente, associado a um momento angular intrínseco, por sua vez, denominado spin.

Do ponto de vista histórico, os fenômenos relacionados ao spin do elétron motivaram discussões cruciais, deixando evidente a necessidade de uma teoria que levasse em conta um quarto grau de liberdade para o elétron. Foi onde a Mecânica Quântica Relativista de Dirac obteve grande êxito, ao mostrar que a existência do grau de liberdade de spin é absolutamente necessária a uma teoria quântica para um elétron que se move com uma velocidade próxima à da luz, ou seja, um elétron relativista. O primeiro experimento a evidenciar um momento angular intrínseco associado ao elétron foi realizado por Stern e Gerlach (GERLACH; STERN, 1922), incidindo um feixe de átomos de prata<sup>6</sup> em uma região sob a influência de campo magnético não uniforme, com o objetivo de medir o seu momento magnético orbital. Do ponto de vista da teoria eletromagnética clássica, o átomo de prata deve possuir momento de dipolo magnético permanente associado ao movimento orbital de seu elétron mais externo. Em primeira análise, considere que o elétron mova-se em uma órbita de Bohr (em torno do núcleo atômico), de acordo com a Figura 1.1.

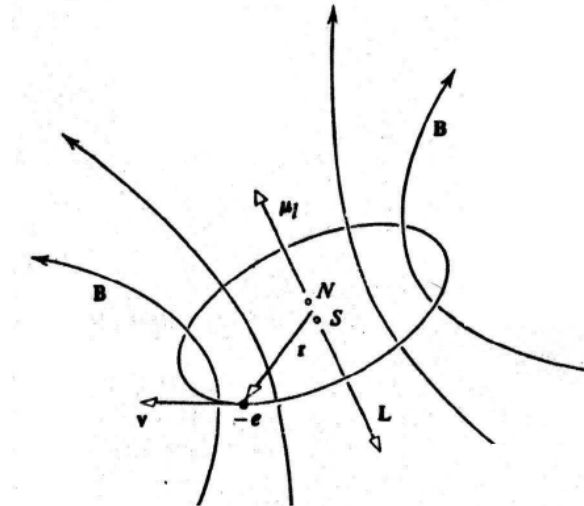


Figura 1.1 - FONTE (EISBERG; RESNICK, 1985). Mostra o momento angular orbital  $L$  e o momento de dipolo magnético orbital  $\mu_\ell$  para um elétron que se move, com velocidade  $v$ , em uma órbita de Bohr. Longe da órbita, o campo magnético  $B$ , produzido pelo movimento do elétron, é idêntico ao campo magnético produzido por um dipolo magnético cujos pólos estão indicados por  $N$  e  $S$ .

De maneira simples<sup>7</sup>, mostra-se que a razão entre o módulo do momento de dipolo magnético orbital e o módulo do momento angular orbital, conhecida por razão giro-magnética e denotada por  $\gamma$ , cujo resultado relaciona constantes universais, ou seja,  $\gamma = \mu_\ell / L = e / 2m_e$  (onde  $m_e$  e  $-e$  são, respectivamente, a massa e a carga do elétron), é usualmente escrita como

$$\gamma = \mu_B / \hbar, \quad (1.1)$$

<sup>6</sup>O átomo de prata tem apenas um elétron em sua camada mais externa, todas as outras camadas estão saturadas. Como a massa do elétron é muito menor do que a massa do núcleo atômico, é possível mostrar que o momento magnético do átomo pode ser aproximado pelo momento magnético do elétron.

<sup>7</sup>Veja, por exemplo, Eisberg e Resnick (EISBERG; RESNICK, 1985).

onde  $\mu_B$  é a unidade natural de medida do momento do dipolo magnético orbital atômico conhecida como magnéton de Bohr<sup>8</sup> e  $\hbar = h/2\pi$ , onde  $h$  é constante de Planck<sup>9</sup>, é a unidade natural de medida do momento angular orbital atômico. Considerando que o elétron mova-se em uma órbita sob a influência de potencial central, o momento de dipolo magnético orbital será perpendicular ao plano da órbita. Nesse caso, é muito simples mostrar que  $\boldsymbol{\mu}_\ell$  e  $\mathbf{L}$  apresentam a seguinte relação de proporcionalidade

$$\boldsymbol{\mu}_\ell = -\gamma \mathbf{L}. \quad (1.2)$$

Se imerso em um campo magnético uniforme  $\mathbf{B}$ , o dipolo magnético ficará sob a influência de um torque  $\boldsymbol{\tau}$  dado por

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu}_\ell \times \mathbf{B}. \quad (1.3)$$

Do teorema do momento angular, ou seja,  $\boldsymbol{\tau} = d\mathbf{L}/dt$ , segue a equação de movimento:

$$d\mathbf{L}/dt = -\gamma(\mathbf{L} \times \mathbf{B}). \quad (1.4)$$

O torque  $\boldsymbol{\tau}$ , promovido pelo campo magnético  $\mathbf{B}$ , é sempre perpendicular a  $\mathbf{L}$ , de forma que permanecem constantes tanto os módulos dos vetores  $\mathbf{L}$  e  $\mathbf{B}$ , quanto o ângulo  $\theta$  formado entre eles. Assim, podemos dizer que  $\boldsymbol{\mu}_\ell$  (ou  $\mathbf{L}$ , lembrando que  $\boldsymbol{\mu}_\ell = -\gamma \mathbf{L}$ ) executa um movimento de precessão em torno de  $\mathbf{B}$ , conhecido como precessão de Larmor, cuja velocidade angular de precessão é tal que

$$\boldsymbol{\omega} = \gamma \mathbf{B}. \quad (1.5)$$

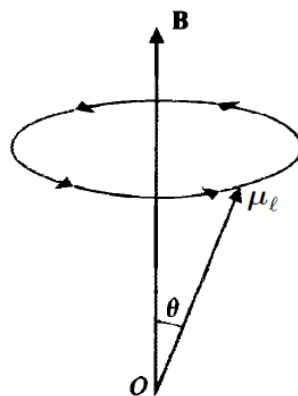


Figura 1.2 - O átomo de prata possui um momento angular orbital  $\mathbf{L}$  e um momento magnético orbital  $\boldsymbol{\mu}_\ell$ , os quais estão relacionados pela Eq. 1.2. Digamos que a orientação do campo magnético  $\mathbf{B}$  defina o eixo  $z$ , então, durante o movimento de precessão, a componente  $\mu_{\ell z}$  deve permanecer constante, enquanto que as componentes  $\mu_{\ell x}$  e  $\mu_{\ell y}$  devem oscilar ciclicamente em torno da origem.

<sup>8</sup>Magnéton de Bohr  $\mu_B = 9.274\ 08(4) \times 10^{-24}$  joule/tesla.

<sup>9</sup>Constante de Planck  $h = 6.626\ 18(4) \times 10^{-34}$  joule · segundo.

Conforme ilustrado pela Fig. 1.3, na experiência realizada por Stern e Gerlach, um feixe de átomos prata atravessa uma região sob a influência de campo magnético não-homogêneo produzido por um ímã e, na saída do ímã, ocorre a deposição dos átomos sobre uma placa coletora. Lembre-se que, sob influência de um campo magnético não homogêneo, além do torque, haverá uma força de translação agindo sobre o dipolo magnético. De acordo com a configuração do campo magnético produzido pelo ímã (conforme mostrado na Fig. 1.3 (b)), na região próxima ao centro do plano  $x - z$ , haverá sempre uma componente da força resultante na direção de maior variação da intensidade do campo, ou seja, sobre o eixo  $z$ , de forma que uma boa aproximação para a força média resultante permite ainda desprezar os efeitos das bordas, isto é,

$$\mathbf{F} = \nabla (\boldsymbol{\mu}_\ell \cdot \mathbf{B}) = \mu_{\ell z} \nabla B_z. \quad (1.6)$$

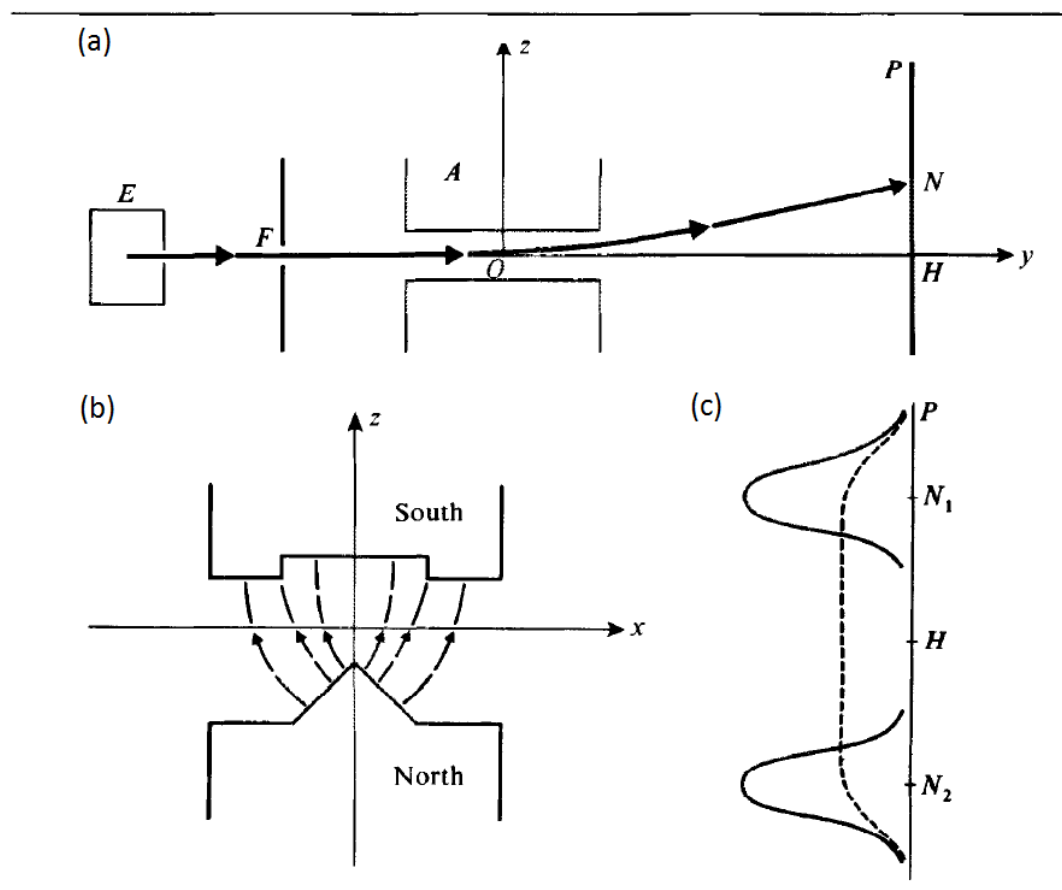


Figura 1.3 - FONTE (COHEN-TANNOUJJI et al., 1977). Ilustração do aparato experimental utilizado por Stern e Gerlach. (a) O forno, indicado por  $E$ , produz um feixe de átomos de prata eletricamente neutros. Por meio de um diafragma  $F$ , o feixe alcança uma região sob a influência de um campo magnético não uniforme produzido por um ímã  $A$ . Na saída do ímã, os átomos atingem uma placa coletora  $P$ . (b) Mostra a seção transversal do ímã e as linhas do campo magnético produzido pelo ímã. (c) A linha contínua mostra o resultado observado e a pontilhada o resultado classicamente esperado.

Portanto, a força resultante  $\mathbf{F}$  que age sobre o átomo é paralela ao eixo  $z$  e seu módulo é proporcional a  $\mu_{\ell z}$ . Conforme ilustrado pela Fig. 1.3 (a), o diafragma seleciona átomos com velocidade paralela ao eixo  $y$  e, na medida em que eles atravessam a extensão longitudinal entre os polos do imã, a força resultante  $\mathbf{F}$  atua sobre os átomos provocando o deslocamento transversal dos mesmos. Denotemos por  $\overline{HN}$ , ainda de acordo com a Fig. 1.3 (a), o deslocamento transversal atômico medido sobre a placa coletora. Ainda é possível mostrar que, assim como o módulo da força resultante, o deslocamento transversal também é proporcional a  $\mu_{\ell z}$ , de forma que a medida do comprimento  $\overline{HN}$  fornece diretamente o valor da componente  $\mu_{\ell z}$ . Considerando que o feixe é constituído por um grande número de átomos e que, para cada átomo,  $\boldsymbol{\mu}_{\ell}$  pode assumir qualquer orientação em relação ao eixo  $z$  (direção definida pelo gradiente do campo magnético), do ponto de vista da eletrodinâmica clássica, era esperado que os valores encontrados para  $\mu_{\ell z}$  formassem, sobre a placa coletora, uma mancha contínua estendida sobre  $z$ , disposta simetricamente em relação a  $H$  e limitada pelos valores  $\mu_{\ell}$  e  $-\mu_{\ell}$  (casos extremos, em que o momento de dipolo magnético atômico apresenta um alinhamento paralelo ou antiparalelo em relação ao campo magnético produzido pelo imã). Na Fig. 1.3 (c), a previsão clássica é representada pela linha tracejada, os valores  $-\mu_{\ell}$  e  $\mu_{\ell}$  correspondem, respectivamente, a  $N_1$  e  $N_2$ .

Fato marcante com drásticas consequências junto ao desenvolvimento da teoria quântica, os resultados experimentais obtidos por Stern e Gerlach destoavam radicalmente não apenas das previsões clássicas, mas também desafiava o que havia de mais sofisticado em termos de teoria quântica para a época. Assim, antes de discutirmos os resultados obtidos por Stern e Gerlach, devemos fazer algumas importantes considerações. Na época em que o experimento foi realizado (ou seja, em 1922), predominavam os modelos semiclássicos, como o modelo desenvolvido por Bohr e Sommerfeld, o qual já especulava sobre a possibilidade de quantização da orientação espacial do plano orbital do elétron, em relação a um campo magnético externo, fenômeno que ficou conhecido como quantização espacial<sup>10</sup>.

---

<sup>10</sup>No modelo de Bohr, as órbitas permitidas ao elétron são aquelas cujo módulo do momento angular eletrônico é dado por um múltiplo inteiro de  $\hbar$  (isto é,  $L = n\hbar$ , onde  $n = 1, 2, 3, \dots$ ), de forma que a quantização do módulo do momento angular implica na quantização da energia permitida para o elétron. O modelo de Bohr obteve grande sucesso, ao explicar, em primeira análise, as raias espectrais observadas para o átomo de hidrogênio. Entretanto, medidas que apresentavam um maior grau de resolução revelaram que algumas das raias eram compostas por um conjunto de linhas muito próximas entre si, conjunto conhecido como estrutura fina do espectro. Na tentativa de interpretar tais medidas, utilizando uma abordagem complementar ao modelo de Bohr, Sommerfeld incluiu os efeitos de uma dinâmica relativística. Em contraste ao que ocorre no modelo de Bohr, onde os elétrons, em diferentes níveis de energia, movem-se em órbitas circulares coplanares, no modelo de Sommerfeld, as órbitas são elípticas e ocorrem em planos orbitais com a orientação espacial quantizada em relação à orientação de um campo magnético externo. Assim, os dois números quânticos introduzidos pelo modelo de Bohr (número quântico principal e número quântico secundário) representam a quantização da energia permitida ao elétron e a quantização do módulo de seu momento angular. Introduzido por Sommerfeld, o número quântico azimutal representa a quantização da orientação do vetor momento angular no espaço, conhecida como quantização espacial.

Em 1926, Erwin Schroedinger, por meio de uma série de trabalhos, apresentou sua versão para a teoria quântica não-relativista, conhecida como mecânica quântica ondulatória. A teoria de Schroedinger marca presença junto à gênese da teoria quântica moderna, superando importantes limitações apresentadas pelas teorias semiclássicas<sup>11</sup>. Em particular, a mecânica quântica de Schroedinger fornece, sem ambiguidade possível, as relações entre três dos (quatro) números quânticos que caracterizam o átomo de um elétron. O número quântico principal, denotado por  $n$ , fornece as energias permitidas ao elétron,

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} eV, \quad (1.7)$$

onde  $n = 1, 2, 3, \dots$ , ou seja,  $n$  deve ser um número inteiro não nulo. O número quântico orbital, denotado por  $\ell$ , fornece o módulo do momento angular orbital,

$$L = \sqrt{\ell(\ell + 1)} \hbar, \quad (1.8)$$

onde  $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ . O número quântico azimutal (ou magnético), denotado por  $m_\ell$ , fornece a componente  $z$  do momento angular orbital,

$$L_z = m_\ell \hbar, \quad (1.9)$$

onde  $m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, \ell - 1, \ell$ . Apesar do estrondoso sucesso alcançado na interpretação das propriedades do átomo de um elétron, veremos que a mecânica quântica ondulatória não permite descrever, *a priori*, os resultados observados por Stern e Gerlach.

---

<sup>11</sup>De particular interesse ao que será discutido, para o caso do átomo de um elétron, conquanto os modelos de Bohr e de Schroedinger forneçam o mesmo valor da energia para o estado fundamental, os mesmos divergem quanto à previsão do módulo do momento angular orbital eletrônico. O modelo de Bohr prevê, para o estado fundamental,  $L = \hbar$ , enquanto que o modelo de Schroedinger prevê  $L = 0$ . A mecânica quântica ondulatória sobrepujou algumas das principais inconsistências apresentadas pelas teorias semiclássicas. No escopo da teoria de Schroedinger, o problema da quantização da energia decorre de maneira natural, sob a forma de um problema de valor de contorno, apesar da regra de quantização *ad hoc* adotada pelo modelo de Bohr. Contudo, a mudança de paradigma veio em oposição à interpretação determinística do movimento orbital do elétron apresentada pelo modelo de Bohr. A interpretação de Born para a solução da chamada equação de Schroedinger, conhecida como função de onda e denotada por  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , considera que a quantidade  $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}$  representa a probabilidade de encontrar o elétron, em um determinado instante  $t$ , no interior do elemento de volume  $d\mathbf{r}$  que preenche o espaço em torno de um dado ponto localizado pelo vetor posição  $\mathbf{r}$ . Evidentemente, quando somada sobre todo o espaço, a probabilidade de encontrar o elétron deve ser de cem por cento; expressando matematicamente,  $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1$ . Na interpretação probabilística de Born, a função de onda permite determinar os valores médios para as grandezas físicas associadas ao elétron (de acordo com um dos postulados da mecânica quântica, quantidades dinâmicas fisicamente observáveis são descritas por operadores que atuam em um espaço vetorial com propriedades especiais, conhecido como espaço de Hilbert), assim como a incerteza em torno do valor médio, também chamada de desvio padrão, de forma que o produto entre incertezas para um par de grandezas físicas deve satisfazer a relação de Heisenberg, no caso dos observáveis posição e momentum,  $\Delta x_i \Delta p_i \geq \hbar/2$  (onde  $i = x, y, z$ ). Assim, o princípio da incerteza de Heisenberg estabelece um limite experimental, afirmando que não é possível determinar simultaneamente os valores exatos para a posição e para o momento linear, associados, por exemplo, ao movimento orbital do elétron em torno do núcleo.

A divisão do feixe de átomos em duas componentes simetricamente distribuídas<sup>12</sup>, conforme mostrado pela Fig. 1.3 (c) ocorre na experiência de Stern e Gerlach, não representa apenas a prova de que a orientação do vetor momento angular deve ser quantizada em relação à direção definida pelo campo magnético aplicado<sup>13</sup>, como também revela a existência de um momento angular intrínseco associado ao elétron, o qual torna possível a interação do elétron com o campo magnético externo, ainda que o elétron apresente um momento magnético orbital nulo. Postulado por Uhlenbeck e Goudsmit, o momento angular intrínseco apresentado pelo elétron, conhecido como momento angular de spin, denotado por  $\mathbf{S}$ , não está relacionado com qualquer forma de movimento que possa ser associado ao elétron (isto é, não está relacionado com graus externos de liberdade), assim, como tal, não possui análogo clássico. O spin é uma propriedade fundamental do elétron, ou seja, além de possuir massa e carga, o elétron possui um momento de dipolo magnético intrínseco, denotado por  $\boldsymbol{\mu}_s$ , e, portanto, comporta-se como um pequeníssimo ímã. A rigor, a teoria que permite estabelecer a relação entre o momento angular intrínseco  $\mathbf{S}$  e o momento de dipolo magnético intrínseco  $\boldsymbol{\mu}_s$  é extremamente elaborada, de forma que uma descrição detalhada dos cálculos que levam ao resultado que apresentaremos a seguir foge completamente ao objetivo deste trabalho. O coeficiente da relação entre  $\boldsymbol{\mu}_s$  e  $\mathbf{S}$  é determinado experimentalmente com enorme precisão, os resultados previstos pela eletrodinâmica quântica e os resultados obtidos pelos experimentos apresentam um impressionante acordo,

$$\boldsymbol{\mu}_s = -g_e \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}, \quad (1.10)$$

onde

$$g_e = 2 \times 1.001\,159\,657(4), \quad (1.11)$$

por definição, é o fator-g de spin para um elétron no vácuo. A teoria formulada por Dirac, essencialmente relativística, prediz  $g_e = 2$ , enquanto que a correção sobre este valor é compreendida em termos da interação do elétron com seu próprio campo de radiação<sup>14</sup>.

---

<sup>12</sup>Diante do que discutimos até o momento, a experiência realizada por Phipps e Taylor, no ano de 1927, é particularmente esclarecedora. Dispondo de um aparato semelhante ao utilizado por Stern e Gerlach, ao invés de átomos de prata, Phipps e Taylor utilizaram um feixe de átomos de hidrogênio produzidos a uma baixa temperatura, garantindo assim que, em cada átomo, o elétron estaria ocupando o estado fundamental (ou seja, seus números quânticos seriam  $n = 1$ ,  $\ell = 0$  e  $m_\ell = 0$ ). Então, pressupondo que os números quânticos  $n$ ,  $\ell$  e  $m_\ell$  sejam suficientes para determinar o estado atômico, não deveríamos esperar que o feixe de átomos fosse afetado pelo campo magnético produzido pelo ímã, haja vista que  $m_\ell = 0$  implica em  $\mu_{\ell z} = 0$  (pois  $\mu_{\ell z} = -m_\ell \mu_B$ ). Contudo, Phipps e Taylor obtiveram resultados semelhantes aos obtidos por Stern e Gerlach, o que pode ser explicado, conforme mencionamos, pelo fato do átomo de prata possuir apenas um elétron desemparelhado.

<sup>13</sup>Sendo o átomo um sistema esfericamente simétrico, não há para esse sistema uma direção privilegiada, portanto, qualquer que seja a direção escolhida para análise pelo aparato de Stern-Gerlach, o resultado observado será o mesmo, isto é, o feixe de átomos irá separar-se em componentes discretas. Dizemos, assim, que a orientação do campo magnético produzido pelo aparato de Stern Gerlach define a direção correspondente ao eixo  $z$  e que a projeção do vetor momento angular sobre esta direção é quantizada.

<sup>14</sup>Veja, por exemplo, Peskin e Schroeder (PESKIN; SCHROEDER, 1995).



Outra importante conclusão decorrente dos resultados da experiência de Stern e Gerlach, a projeção do momento de dipolo magnético de spin sobre a direção definida pelo campo magnético aplicado, admite apenas dois valores como possíveis resultados para sua medida, os quais possuem mesma magnitude e sinais opostos, isto é,  $-\mu_B$  e  $+\mu_B$ . Por conseguinte, restrição semelhante deve ocorrer aos valores associados ao momento angular de spin  $\mathbf{S}$ ; se considerarmos que a direção do campo magnético externo define o eixo  $z$ , então, uma medida da componente  $S_z$  terá como resultado, qualquer que seja o estado ocupado pelo elétron, um de dois valores possíveis, isto é,  $-\hbar/2$  ou  $+\hbar/2$ . Assim, em analogia a Equação 1.9, podemos escrever

$$S_z = m_s \hbar \quad (1.12)$$

e, portanto, podemos concluir que  $m_s$  apresenta dois valores possíveis, ou seja,  $-s$  e  $+s$ , onde  $s = 1/2$  é o número quântico momento angular intrínseco, também conhecido como número quântico de spin, o qual permite especificar o grau de liberdade interno associado ao elétron e determinar completamente o espectro observado para átomos hidrogenóides<sup>15</sup>. Importante mencionar que, antes mesmo à experiência realizada por Stern e Gerlach, o efeito Zeeman já era conhecido. Sabia-se que as raias do espectro atômico desdobravam-se na presença de um campo magnético uniforme, entretanto, contrário ao que ocorria na experiência de Stern e Gerlach, o experimento realizado por Zeeman não evidenciava diretamente uma quantização no espaço. No efeito Zeeman, quando um átomo está sob a influência de um campo magnético externo uniforme, digamos  $\mathbf{B}$ , cada componente do espectro atômico desdobra-se em um certo número de linhas equidistantes com espaçamento proporcional à intensidade de  $\mathbf{B}$ . Diante do que foi discutido, particularmente interessante e também esclarecedor é o caso do átomo de hidrogênio. Com o elétron ocupando o estado fundamental, o átomo de hidrogênio deve portar um momento magnético orbital nulo e, portanto, o desdobramento Zeeman deve ocorrer, para o estado fundamental, com duas componentes discretas associadas exclusivamente à orientação do momento de dipolo magnético de spin do átomo com relação à direção do campo magnético externo. Assim, a magnitude do desdobramento Zeeman, denotada por  $\Delta_Z$ , está relacionada com os dois valores permitidos para a energia potencial orientacional  $E_Z$ :

$$E_Z = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} \approx \pm \mu_B B. \quad (1.13)$$

---

<sup>15</sup>No caso do átomo de hidrogênio, onde o núcleo e o elétron interagem por meio de uma força central, o operador energia (ou hamiltoniano), denotado por  $\hat{H}$ , junto com os operadores  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{S}^2$  e  $\hat{S}_z$  formam um conjunto completo de observáveis compatíveis. Pode-se construir uma base completa, pertencente ao espaço de Hilbert, para a qual tais operadores assumem uma representação matricial diagonal. As Eqs. 1.7, 1.8, 1.9 e 1.12 expressam os autovalores, obtidos na base em questão, para os operadores correspondentes. As Eqs. 1.8 e 1.9 podem ser obtidas das relações fundamentais de comutação para as componentes do momento angular orbital. Naturalmente, as componentes do momento angular de spin obedecem a relações semelhantes, ou seja,  $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$ ,  $[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x$ ,  $[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$  e  $[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$ , de onde decorrem a Eq. 1.12 e a quantização do módulo do momento angular de spin, isto é,  $S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{3}\hbar/2$ .

Na grande maioria das situações<sup>16</sup>, pode-se considerar o valor  $g_e = 2$ . Teremos, portanto, dois níveis de energia separados por uma diferença  $\Delta_Z = 2\mu_B B$ , dispostos simetricamente com relação à energia do nível fundamental. Esta, entretanto, é a forma mais simples pela qual o efeito Zeeman anômalo pode ser registrado<sup>17</sup>. Observado ainda no final do século XIX, a compreensão do efeito Zeeman foi determinante para a consolidação do conceito do spin junto à teoria quântica<sup>18</sup>. A esta altura, está evidente a importância do átomo de hidrogênio, na condição de objeto de estudo, junto ao desenvolvimento da teoria quântica e, em particular, da compreensão dos fenômenos relacionados ao spin. Trata-se do mais simples átomo presente na natureza, constituído por um núcleo (carregado positivamente) e um elétron, os quais interagem por meio da atração Coulombiana. Sabe-se que parte dos níveis que compõem a chamada estrutura fina do espectro do átomo de hidrogênio decorre do acoplamento spin-órbita (SO). Tal efeito pode ser qualitativamente explicado de maneira muito simples e intuitiva. Contrário ao que ocorre no efeito Zeeman, o acoplamento SO possui causas que são internas ao átomo; havendo movimento relativo entre o núcleo e o elétron, em um referencial fixo sobre a posição do elétron, manifestar-se-á o campo magnético oriundo do movimento do núcleo, isto é, da corrente nuclear. Do ponto de vista da eletrodinâmica clássica, tal campo magnético, digamos  $\mathbf{B}_{so}$ , é resultado da transformação de Lorentz efetuada sobre o campo elétrico que é produzido pelo núcleo. Com efeito,

$$\mathbf{B}_{so} = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E}(r), \quad (1.14)$$

onde  $-\mathbf{v}$  é a velocidade com que o núcleo se desloca. Note que a intensidade do campo elétrico, produzido pelo núcleo e presenciado pelo elétron, depende apenas do módulo da distância relativa entre ambos, a qual estamos indicando por  $r$ . Tais argumentos explicam qualitativamente a interação SO, contudo, os resultados obtidos não são quantitativamente consistentes, pois negligenciam a aceleração do elétron e, por conseguinte, de seu referencial. Como consequência, com o chamado fator de Thomas<sup>19</sup>, a energia associada ao acoplamento SO é reduzida pela metade. A rigor, sendo um efeito essencialmente relativístico, o acoplamento SO é obtido, segundo a formulação relativista da mecânica quântica, tomando o limite de baixas energias e considerando termos até a primeira ordem em  $1/c^2$ .

---

<sup>16</sup>Como veremos, em meios materiais, o fator-g tem seu valor fortemente renormalizado pelas interações, onde podemos assumir perfeitamente o valor  $g_e = 2$ .

<sup>17</sup>Em geral, o momento angular do elétron é dado pela soma de seu momento angular orbital com seu momento angular de spin. No caso de átomos multieletrônicos, deve-se considerar o momento angular total como resultado da soma dos momentos angulares associados aos elétrons opticamente ativos. Assim, o desdobramento das linhas espectrais em várias componentes discretas ocorre em função das possíveis orientações que o momento angular total do átomo pode assumir em relação ao campo magnético aplicado.

<sup>18</sup>No ano de 1925, no mesmo trabalho em que enunciou seu famoso princípio de exclusão, Pauli mostrou que a adição de um novo grau de liberdade para o elétron poderia explicar o desdobramento das linhas espectrais na presença de um campo magnético externo uniforme, ou seja, o efeito observado por Zeeman.

<sup>19</sup>Uma discussão detalhada pode ser encontrada no livro de Sin-itiro Tomonaga ([TOMONAGA, 1997](#)).

No âmbito da spintrônica semicondutora, o acoplamento SO encontra uma aplicação de destaque junto ao já mencionado transistor de spin (DATTA; DAS, 1990). Em nanoestruturas compostas por semicondutores III-V, os estados de condução ficam sob a influência de um campo magnético interno ao sistema, como consequência da superposição dos potenciais de *bulk*, chamado efeito Dresselhaus, e de confinamento, chamado efeito Rashba, sempre que tais potenciais estejam desprovidos de um centro de inversão no espaço. A proposta de Datta e Das fundamenta-se sobre a possibilidade da manipulação da precessão do spin do elétron mediada pela modulação da intensidade do acoplamento Rashba com o confinamento dos elétrons em canais formados em heterojunções semicondutoras.

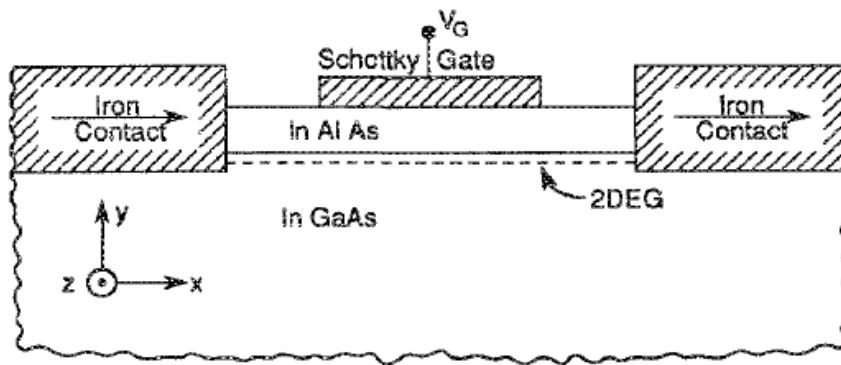


Figura 1.4 - FONTE (DATTA; DAS, 1990). Na representação esquemática proposta por Datta e Das, a fonte (ou polarizador) e o dreno (ou analisador) são contatos constituídos por materiais ferromagnéticos, conectados por um canal formado em uma heterojunção semicondutora (em particular, InAlAs/InGaAs). O polarizador seleciona a orientação do spin dos elétrons que alcançam o canal. Considerando um regime balístico, o transporte de elétrons ocorre através do canal (no eixo  $x$ ) e o analisador define uma direção preferencial para a detecção do spin. Através de um eletrodo  $V_G$ , é possível modular a intensidade do campo magnético interno (devido à assimetria do potencial de confinamento), denotado por  $\mathbf{B}_R(\mathbf{k}_{\parallel})$ , e assim controlar a frequência angular da precessão do spin do elétron em torno de  $\mathbf{B}_R(\mathbf{k}_{\parallel})$ , considerando que tal frequência é dada por  $|\mathbf{B}_R(\mathbf{k}_{\parallel})|$ .

Entre as nanoestruturas com potencial de aplicação para a spintrônica, particularmente no caso do transistor de spin, as heterojunções semicondutoras formam uma classe especial. Conforme mostrado esquematicamente na Figura 1.5, o alto grau de assimetria do potencial de condução possibilita o confinamento dos elétrons por meio de um poço quântico triangular, resultando em um acoplamento Rashba forte cuja intensidade pode também variar com a densidade de carga. Para estados eletrônicos com spins opostos, a separação da energia está relacionada com o módulo do campo magnético efetivo, ou seja,

$$\mathbf{B}_R(\mathbf{k}_{\parallel}) = (2/\hbar) \alpha \mathbf{k} \times \mathbf{e}_z, \quad (1.15)$$

onde

$$\Delta_R(k_{\parallel}) = \hbar |\mathbf{B}_R(\mathbf{k}_{\parallel})|. \quad (1.16)$$

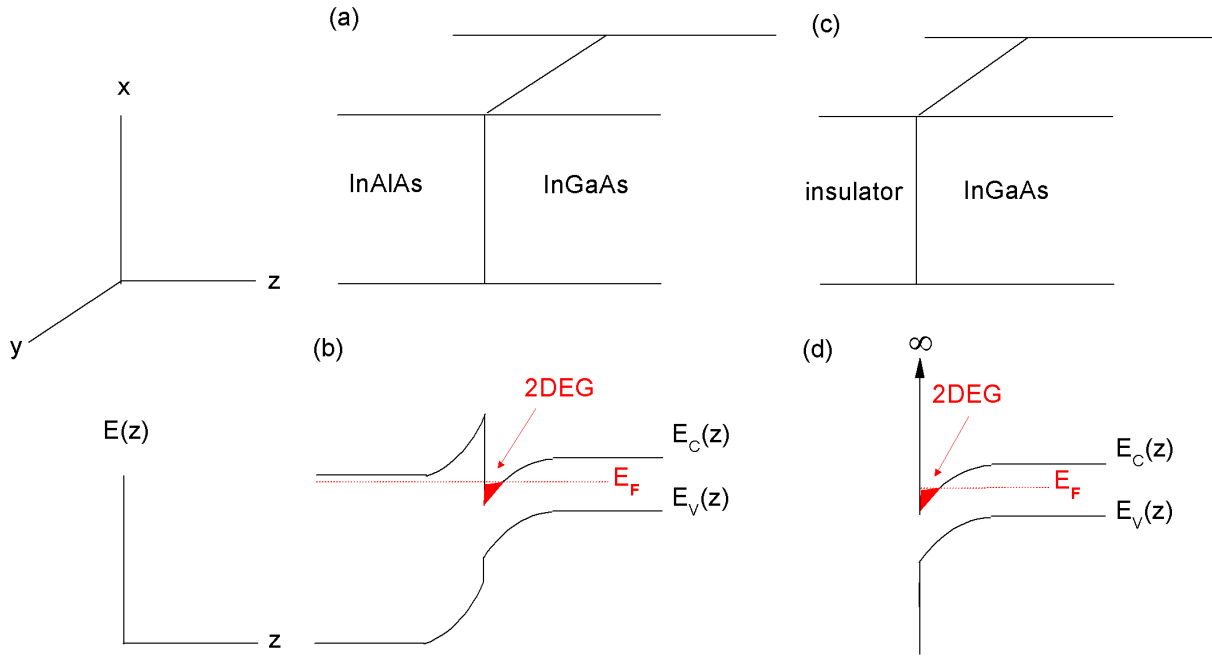


Figura 1.5 - (a) Representação pictórica de uma heterojunção; uma interface abrupta entre diferentes materiais semicondutores, produzida artificialmente com precisão em escala atômica. (b) Diagramação pictórica para as bandas de condução e valência na situação de equilíbrio termodinâmico. Na interface, o diagrama apresenta uma descontinuidade abrupta oriunda da diferença da energia de gap entre os materiais que compõem a heterojunção; o potencial de condução permite o confinamento de um gás bidimensional de elétrons, no plano paralelo à interface entre os diferentes materiais. (c) Representa a heterojunção para o caso em que um isolante perfeito constitui a região da barreira. (d) Mostra a diagramação das bandas de condução e valência quando consideramos a aproximação de barreira perfeitamente isolante. A amplitude de onda deve ser nula na interface e, com isso, a probabilidade de encontrar o elétron não se estende à região de barreira.

Observe que, nessa aproximação, o *spin splitting* varia linearmente com o módulo do vetor de onda restrito ao plano paralelo à interface do poço<sup>20</sup>, ou seja,  $\Delta_R(k_{\parallel}) = 2\alpha k_{\parallel}$ . O coeficiente ( $\alpha$ ) dessa relação é característica exclusiva da heteroestrutura e depende tanto dos materiais que a compõem quanto da geometria do potencial de confinamento. Uma simplificação muito útil consiste em considerar a região de barreira constituída por um isolante perfeito, conforme os perfis das bandas de condução e valência mostrados na Fig. 1.5 (d). Nesse caso, é possível obter uma expressão analítica aproximada para o coeficiente Rashba:

$$\alpha^* = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Delta}{E_g} \frac{2E_g + \Delta}{(E_g + \Delta)(3E_g + 2\Delta)} e\mathcal{E}, \quad (1.17)$$

onde  $m^*$ ,  $E_g$  e  $\Delta$  são parâmetros que caracterizam o material (semicondutor) que constitui o poço e  $\mathcal{E}$  é o módulo do campo elétrico na região próxima à interface (SILVA et al., 1994).

<sup>20</sup>Isto é,  $\mathbf{k}_{\parallel} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$ .

No caso de uma heterojunção ou, de forma geral, de um poço quântico assimétrico<sup>21</sup> composto por um material semiconductor com estrutura cristalina do tipo *zinc-blende* (ou seja, uma estrutura cristalina desprovida de um centro inversão no espaço), ocorre a quebra da simetria axial<sup>22</sup> que caracteriza o acoplamento Rashba, como resultado de uma interferência promovida pelo termo de Dresselhaus<sup>23</sup>:

$$\mathbf{B}_D = (2/\hbar) \beta(k_x \mathbf{e}_x - k_y \mathbf{e}_y) \quad (1.18)$$

onde  $\beta = -\gamma_D \langle k_z^2 \rangle$  e  $\gamma_D$  é um parâmetro que depende exclusivamente da estrutura cristalina em questão. O campo magnético efetivo, resultado de uma superposição entre os termos de Rashba e Dresselhaus, será tal que

$$\mathbf{B}_{eff}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \mathbf{B}_R + \mathbf{B}_D = (2/\hbar) [(\alpha k_y + \beta k_x) \mathbf{e}_x - (\beta k_y + \alpha k_x) \mathbf{e}_y]. \quad (1.19)$$

Convencionalmente, define-se o *spin splitting* em relação ao módulo do campo magnético efetivo; neste caso, uma função tanto da direção cristalina quanto do módulo do vetor de onda no plano:

$$\Delta_s(k_{\parallel}, \vartheta) = \hbar |\mathbf{B}_{eff}(k_{\parallel})| = 2k_{\parallel} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta \sin 2\vartheta}. \quad (1.20)$$

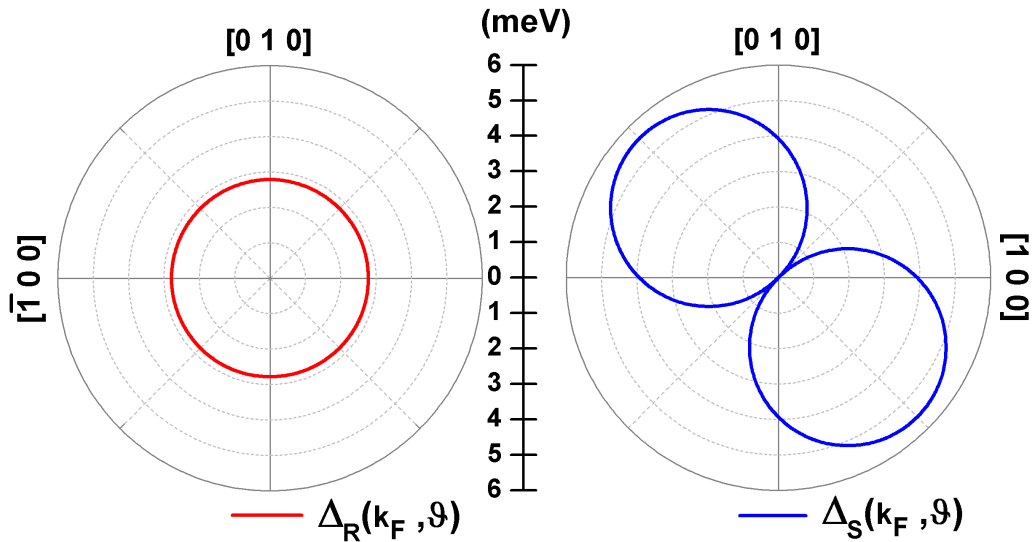


Figura 1.6 - (a) Mostra o desdobramento da energia provocado pelo acoplamento Rashba e a isotropia (no plano paralelo à interface do poço) que o caracteriza. (b) Mostra o caso crítico para o *spin-splitting* resultante da superposição entre os termos de Rashba e Dresselhaus, onde ocorre uma interferência destrutiva para estados com vetor de onda sobre as direções cristalinas  $[110]$  e  $[\bar{1}\bar{1}0]$ .

<sup>21</sup>Caracterizado pela ausência da simetria de inversão especular.

<sup>22</sup>Simetria de rotação em torno da direção de crescimento.

<sup>23</sup>Inicialmente, estamos considerando o termo de Dresselhaus na aproximação linear.

As Eqs. 1.15, 1.18 e 1.19 descrevem o efeito de interferência decorrente da superposição entre os termos lineares de Rashba e Dresselhaus, quando consideramos um poço quântico na aproximação de barreira perfeitamente isolante. Como exemplo, temos os resultados mostrados na Fig. 1.6, onde utilizamos a função de onda variacional de Fang-Howard com a constante de acoplamento SO proposta por de Andrada e Silva et al (SILVA et al., 1994). A situação mostrada na Fig. 1.6 (b), onde temos  $\alpha = \beta$ , é obtida em condições específicas, além de considerarmos a aproximação de barreira perfeitamente isolante, utilizamos uma heterojunção composta por arseneto de gálio (ou seja, isolante/GaAs) com uma densidade eletrônica superficial de  $4.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Para essas mesmas condições, a Figura 1.7 mostra a configuração assumida pelas superfícies de Fermi para estados com spins opostos.

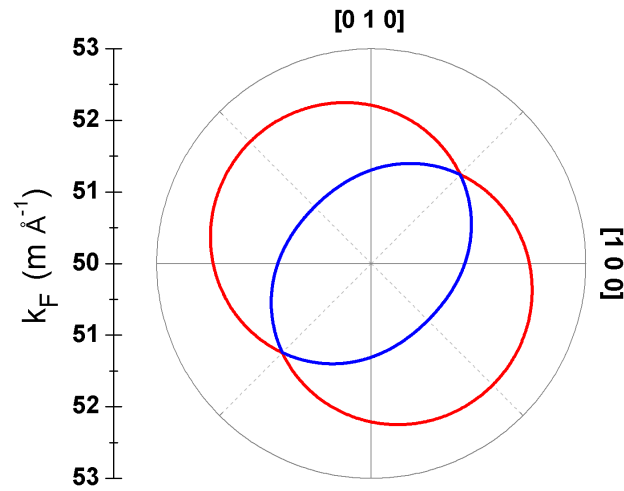


Figura 1.7 - Superfícies de Fermi para estados com spins opostos (isto é, *up* e *down*), na situação em que  $\alpha = \beta$ , obtidas para uma heterojunção composta por GaAs, onde utilizamos a aproximação de barreira perfeitamente isolante e uma densidade eletrônica superficial de  $4.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . O valor obtido para a energia de Fermi foi de 465.7 meV e os parâmetros utilizados para o GaAs foram:  $m^* = 0.067m_e$ ,  $E_g = 1.52 \text{ eV}$ ,  $\Delta = 0.34 \text{ eV}$  e 12.9 para a constante dielétrica.

Portanto, a anisotropia que caracteriza a intensidade do acoplamento SO pode ser modulada com a densidade de carga. Em particular, é crítica a situação para a qual ocorre o fenômeno de interferência destrutiva (mostrado, por exemplo, pelas Figs. 1.6 (b) e 1.7). Para estados com vetor de onda sobre as direções  $[110]$  e  $[\bar{1}\bar{1}0]$ , com a supressão do campo magnético efetivo (o qual, como vimos, depende do vetor de onda), os mecanismos de espalhamento responsáveis pela relaxação do momento linear do portador não alteram a orientação de seu spin. Evidentemente, tal situação é propícia sob o ponto de vista da aplicação, haja vista que a funcionalidade do dispositivo não fica condicionada a um regime em que o transporte de elétrons ocorre balisticamente (SCHLIEMANN et al., 2003).

Por tais motivos, é de particular interesse a situação em que temos  $\alpha = \beta$ , onde a interferência entre os termos de Rashba e Dresselhaus será destrutiva para elétrons que se propagam nas direções cristalinas  $[11]$  e  $[\bar{1}\bar{1}]$ , e construtiva para elétrons com vetor de onda sobre as direções  $[\bar{1}1]$  e  $[1\bar{1}]$ . Tal situação ocorre apenas sob condições especiais, para as quais os campos efetivos de Rashba e Dresselhaus adquirem a mesma intensidade. Entretanto, sabe-se que esses termos não são determinados de maneira trivial, ambos apresentam uma dependência com o potencial de confinamento, com a estrutura cristalina do material em questão e podem também variar em função da densidade de carga. Entre os objetivos desta tese, consta o desenvolvimento de um modelo que permita determinar em quais estruturas e sob quais circunstâncias tal situação de máxima anisotropia poderia ser observada. Para tanto, faz-se necessário o desenvolvimento de um modelo realista, cujas previsões estejam minimamente em razoável acordo com resultados experimentais disponíveis na literatura. Diante de tal premissa, a despeito das aproximações que foram consideradas para os resultados apresentados, mostrar-se-ão imprescindíveis os efeitos de penetração da função de onda na região de barreira e dos termos não lineares no hamiltoniano de Dresselhaus. Em especial, uma limitação importante inerente ao modelo que foi apresentado concerne ao valor nulo atribuído para amplitude de onda na interface; não há um consenso sobre a melhor forma de abordar este problema, em modelos que consideram muitas bandas geralmente são utilizados métodos de integração numérica (WINKLER, 2003; YANG; CHANG, 2006; LAMARI, 2007; LI et al., 2008), onde a ocorrência de soluções espúrias e a inconsistência na análise da continuidade da função envelope na região de fronteira são problemas recorrentes (SOLER, 2003). Uma questão ainda mais delicada diz respeito ao efeito de penetração da função de onda na região de barreira considerando condições de contorno que dependem do grau de liberdade de spin e sua conexão com anisotropia decorrente da influência do termo de Dresselhaus. Essas são questões que apresentam um interesse prático reconhecido no atual contexto da física dos semicondutores. Por outro lado, o forte apelo das propostas de cunho tecnológico tem restringido o estudo dos efeitos da interação SO ao limite de campo magnético nulo, o que não favoreceu a compreensão dos fenômenos em sua totalidade. Conforme será mostrado nesta tese, o acoplamento Rashba possui uma estrutura mais ampla que está além do já conhecido termo remanescente no limite de campo magnético nulo. Em poços quânticos sob a influência de um campo magnético externo uniforme, nós mostramos que o acoplamento Rashba contribui com dois termos sobre o hamiltoniano efetivo para elétrons, sendo um dos termos finito mesmo para estruturas com centro de inversão no espaço. Assim, fica demonstrado que o acoplamento Rashba é responsável pela anisotropia observada para o fator  $g$  de spin em poços quânticos semicondutores, onde a geometria do potencial de confinamento contribui decisivamente para a renormalização do fator  $g$  de spin determinando o processo de interferência entre os termos oriundos da interação SO.





## 2 MODELO DE KANE

### 2.1 Alguns conceitos básicos em física da estado sólido

Um sólido cristalino possui uma estrutura microscópica que se caracteriza pelo ordenamento espacial dos átomos (íons) ou moléculas que o constituem. De forma conceitual, define-se uma estrutura cristalina como o produto resultante de um ordenamento espacial, com periodicidade perfeita, de réplicas de uma estrutura elementar conhecida como célula unitária, conforme mostrado de forma pictórica na Figura 2.1 para o caso de uma estrutura cristalina hipotética. No escopo da teoria dos sólidos cristalinos, um conceito

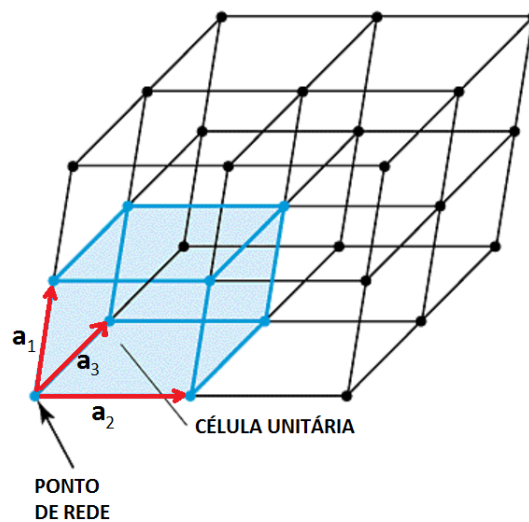


Figura 2.1 - Representação pictórica de uma estrutura cristalina hipotética. Os átomos (ou íons) ocupariam as posições correspondentes aos vértices de cada célula unitária (representada pelo cubo elementar); tais posições definem a geometria da rede de Bravais para a estrutura em questão.

fundamental é o da rede de Bravais <sup>1</sup>, para a qual as seguintes definições são equivalentes:

(I) Uma rede de Bravais é um arranjo infinito de pontos discretos, o arranjo e a orientação de seus pontos parecem exatamente os mesmos quando visualizados de qualquer ponto pertencente à rede.

(II) Uma rede de Bravais (tridimensional) é constituída por todos os pontos com vetores de posição  $\mathbf{R}$  da forma:

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad (2.1)$$

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, conforme ilustrado na figura acima.

<sup>1</sup>Assim denominada em homenagem a Auguste Bravais que demonstrou a sua existência em 1848.

Uma importante propriedade da rede de Bravais é que qualquer ponto de rede, com vetor posição  $\mathbf{R}$ , poder ser obtido através de uma combinação linear dos vetores primitivos e, por esse motivo, dizemos que os vetores primitivos geram a rede. Agora considere a célula unitária mostrada na Figura 2.1 e imagine que cada uma de suas réplicas esteja transladada, em relação a posição original (conforme mostra a Fig. 2.1), por um dos vetores ( $\mathbf{R}$ ) pertencentes à rede. Tal processo de replicação, para uma célula chamada unitária, deve permitir o preenchimento do espaço sem que haja sobreposição entre as células. A Figura 2.1 mostra, além da célula unitária, os vetores primitivos e alguns dos pontos de rede. É importante lembrar que a rede de Bravais é uma construção geométrica definida por conjunto infinito de pontos, o que corresponde, portanto, a um cristal perfeito e infinito. Em um sólido cristalino de dimensões macroscópicas, a grande maioria dos pontos de rede estarão longe da influência da superfície do sólido; ao conjunto dos pontos de rede que não são influenciados pela superfície denominamos cristal volumétrico ou *bulk*.

Após o conceito de rede de Bravais, convém introduzirmos a definição de rede recíproca (RR). A rede recíproca será o conjunto de vetores pertencentes ao espaço de momentos (denotado por  $\mathbb{K}$ , também chamado de espaço recíproco) que satisfazem a seguinte condição:

$$RR = \{\mathbf{G} \in \mathbb{K} \mid e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1\} \quad (2.2)$$

onde  $\mathbf{G} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3$ , com  $m_1, m_2$  e  $m_3$  inteiros;  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ , e  $\mathbf{b}_3$  são os vetores primitivos da rede recíproca, os quais se relacionam com os vetores primitivos da rede de Bravais conforme segue

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}. \quad (2.3)$$

Obtemos  $\mathbf{b}_2$  e  $\mathbf{b}_3$  permutando ciclicamente os índices. É importante observar que a rede recíproca é definida em relação a uma determinada rede de Bravais (por esse motivo a rede Bravais é também chamada de rede direta) e que, pela definição geométrica de rede de Bravais, a rede recíproca também constitui uma rede de Bravais. Uma propriedade importante do conjunto de vetores definidos pela Eq. 2.2, é a de que todos os vetores pertencentes à RR produzem ondas planas que, por sua vez, possuem a mesma periodicidade da rede de Bravais à qual correspondem. Então, se  $\mathbf{R}$  pertence a uma determinada rede de Bravais e  $\mathbf{G}$  pertence à recíproca de tal rede, temos que

$$e^{i\mathbf{G}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.4)$$

O conceito de rede recíproca permite a determinação das bandas de energia (ASHCROFT; MERMIN, 1976) para um sólido cristalino, considerando a lei de conservação do momento associada à simetria de translação da rede de Bravais que caracteriza o sólido em questão.

## 2.2 Elétrons de Bloch

Os sólidos cristalinos podem ser classificados de acordo com a sua capacidade de conduzir corrente elétrica. Essa capacidade pode ser qualitativamente interpretada por meio de um modelo muito simples, onde os átomos que compõem os sólidos são constituídos por um núcleo, os elétrons de *core* (pertencentes às camadas mais internas) e os elétrons de valência. Na aproximação de Born-Openheimer, o núcleo e os elétrons de *core* formam íons que ocupam posições estáticas na rede cristalina, conforme mostrado na Figura 2.1. Os elétrons pertencentes ao *core* e os elétrons de valência possuem valores sensivelmente diferentes associados às suas respectivas energias de ligação, de modo que podemos considerar os elétrons de valência fracamente ligados ao núcleo. Assim, podemos dizer que os elétrons de valência formam um gás de elétrons quase livres e a forma como esses elétrons se distribuem através das chamadas bandas de energia é o que determina as propriedades de condução do meio em questão (ASHCROFT; MERMIN, 1976). Nesse contexto, é importante salientar que, apesar do sistema físico em evidência (o gás de elétrons e os íons da rede) se tratar de um sistema de muitas partículas, as interações de correlação e troca não serão consideradas neste trabalho. Como consequência, a função de onda que descreve o sistema poderá ser escrita como um produto de funções de onda para uma partícula e o hamiltoniano total do sistema poderá ser decomposto em uma soma simples dos hamiltonianos das  $n$  partículas que o constituem. Então, considerando que, em um sólido cristalino, os elétrons de valência formem um gás de elétrons quase livres, onde desprezamos os efeitos de correlação e troca, e os íons ocupem as posições estáticas correspondentes aos pontos de rede, o hamiltoniano monoelétrônico  $\hat{H}_e$  pode ser escrito como:

$$\hat{H}_e = H_e(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + V_{e-e}(\hat{\mathbf{r}}) + V_{e-rede}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (2.5)$$

Os potenciais de interação elétron-elétron e elétron-rede são dependentes da posição; o primeiro é um potencial do tipo Coulombiano e o segundo é um potencial com periodicidade espacial perfeita. De acordo com um dos postulados da mecânica quântica (COHEN-TANNOUDJI et al., 1977), o vetor posição, na condição de variável dinâmica, possui um operador correspondente que atua no espaço de Hilbert. Na descrição de Schroedinger, onde os operadores não dependem do tempo, o conjunto dos autoestados do operador posição  $\{|\mathbf{r}\rangle\}$  forma uma base no espaço de Hilbert, ou seja, as seguintes relações devem ser satisfeitas  $\forall |\mathbf{r}'\rangle \in \{|\mathbf{r}\rangle\}$ :

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}'|\mathbf{r}'\rangle \quad (2.6)$$

com

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \text{e} \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}' |\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}'| = \hat{1}. \quad (2.7)$$

O conjunto dos autovalores  $\{\mathbf{r}\}$  forma um espectro contínuo e as Eqs. 2.7 definem a relação de ortogonalidade e a completitude dos estados da base. Considere o Hamiltoniano 2.5, momentaneamente vamos desprezar a interação elétron-elétron, de modo que podemos associar o hamiltoniano de Bloch a um elétron sob a influência exclusiva de um potencial cristalino, ou seja,

$$H_{Bloch}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + V_{e-rede}(\hat{\mathbf{r}}); \quad (2.8)$$

sendo que seus autoestados ( $|\Psi_E\rangle$ ) e autovalores ( $E$ ) satisfazem a seguinte equação:

$$\left[ \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + V_{e-rede}(\hat{\mathbf{r}}) \right] |\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle. \quad (2.9)$$

Projetando a Eq. 2.9 na base da posição e utilizando a relação de completitude, obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + V_{e-rede}(\hat{\mathbf{r}}) \right] | \mathbf{r}' \rangle \Psi_E(\mathbf{r}') = E\Psi_E(\mathbf{r}), \quad (2.10)$$

onde os elementos de matriz são conhecidos (COHEN-TANNOUJDI et al., 1977):

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle = -i\hbar \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.11)$$

e

$$\langle \mathbf{r} | V_{e-rede}(\hat{\mathbf{r}}) | \mathbf{r}' \rangle = V_{e-rede}(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.12)$$

Portanto, da Eq. 2.10, teremos

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{e-rede}(\mathbf{r}) \right] \Psi_E(\mathbf{r}) = E\Psi_E(\mathbf{r}). \quad (2.13)$$

Note que o potencial de interação elétron-rede possui uma simetria de translação discreta que é característica específica do tipo de arranjo cristalino, de forma que a identidade  $V_{e-rede}(\mathbf{r}) = V_{e-rede}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  será válida para  $\mathbf{R}$  pertencente à rede *Bravais* que, por sua vez, fica bem definida para cada tipo de estrutura. Assim, o teorema de Bloch surge como uma consequência natural da compatibilidade entre o Hamiltoniano de Bloch 2.8 e o operador de translação definido de acordo com estrutura cristalina (ASHCROFT; MERMIN, 1976).

**Teorema 1** (Teorema de Bloch). *Os autoestados de  $H_{Bloch}(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla) = -\hbar^2\nabla^2/2m_e + V_{e-rede}(\mathbf{r})$ , onde  $V_{e-rede}(\mathbf{r}) = V_{e-rede}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ , podem assumir a forma*

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \text{com } u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (2.14)$$

para todo  $\mathbf{R}$  pertencente à rede de direta.

### 2.3 Representação $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

Nas Equações 2.14,  $\mathbf{k}$  é o número quântico característico de um sistema que apresenta uma simetria de translação no espaço. No início deste capítulo, vimos que  $\mathbf{k} \in RR$  e, portanto, está associado a uma simetria de translação discreta. Assim, para um dado  $\mathbf{k}$ , teremos muitas soluções independentes e o número quântico  $n$  permite identificar cada uma dessas soluções que são conhecidas como bandas de energia. Conforme discutimos na seção anterior, pode ser verificado que<sup>2</sup>, conhecida a simetria de translação que caracteriza uma determinada estrutura cristalina, o teorema de Bloch surge como consequência da compatibilidade entre o hamiltoniano de Bloch e o operador de translação que define a simetria da rede de Bravais da estrutura cristalina em questão. Em outras palavras, para uma dada estrutura cristalina, os autoestados do hamiltoniano de Bloch também serão autoestados do operador de translação. Em um trabalho bem difundido (KANE, 1982), Kane estabeleceu critérios para a determinação da estrutura de bandas nas vizinhanças de um dado ponto do espaço recíproco, assim como sua dependência com um pequeno número de parâmetros que podem ser determinados experimentalmente com boa precisão, como, por exemplo, o *gap* de energia e a massa efetiva. Podemos introduzir parte desse formalismo, ao substituírmos as Eqs. 2.14 na Eq. 2.13, ou seja, com a seguinte equação:

$$\left[ \frac{p^{(op)2}}{2m_e} + V_{e-rede}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}^{(op)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.15)$$

Definimos

$$H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla; \mathbf{k}) = \frac{p^{(op)2}}{2m_e} + V_{e-rede}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}^{(op)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad (2.16)$$

onde  $\mathbf{p}^{(op)} = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle d\mathbf{r}' = -i\hbar\nabla$ . Considerando que, para um dado  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ , o operador  $H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla; \mathbf{k} = \mathbf{k}_0)$  possui um conjunto completo de autofunções  $\{u_{\ell\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})\}$ , denominamos este conjunto de representação  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  (ou base  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ). Com efeito,

$$H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla; \mathbf{k} = \mathbf{k}_0) u_{\ell\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = E_{\ell}(\mathbf{k}_0) u_{\ell\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (2.17)$$

Então, podemos utilizar uma expansão na base  $\{u_{\ell\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})\}$  como solução para a Eq. 2.15. A seguir, veremos como o método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  utiliza uma expansão em ondas de Bloch (isto é, utiliza uma expansão na base  $\{u_{\ell\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})\}$ ) e, através de um modelo particularmente simples, permite explorar a estrutura de bandas nas proximidades de certos pontos pertencentes à rede recíproca, conhecidos como pontos de alta simetria (ASHCROFT; MERMIN, 1976). O modelo de Kane utiliza um número restrito de bandas, possibilitando um desenvolvimento analítico para a estrutura eletrônica do *bulk* em torno de um dos pontos de alta simetria.

<sup>2</sup>Veja, por exemplo, Ashcroft e Mermin (ASHCROFT; MERMIN, 1976).

## 2.4 Modelo de Kane com 3 bandas

Entre os chamados pontos de alta simetria, o ponto  $\Gamma$  representa a origem do espaço recíproco, isto é,  $\mathbf{k} = (0, 0, 0) \equiv \Gamma$ . No caso de ligas entre semicondutores que possuem estrutura cristalina do tipo *zinc-blende* (ASHCROFT; MERMIN, 1976), no ponto  $\Gamma$  estão localizados os pontos de máximo relativo da curva que descreve a banda de valência e o de mínimo relativo da curva que descreve a banda de condução; a diferença de energia entre esses dois pontos extremos é denominada energia de *gap* do material em questão. Considere a Eq. 2.17 para  $\mathbf{k}_0 = \Gamma = (0, 0, 0)$ , ou seja,

$$H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla; \mathbf{k} = \Gamma)u_{\ell\Gamma}(\mathbf{r}) = E_{\ell}(\Gamma)u_{\ell\Gamma}(\mathbf{r}). \quad (2.18)$$

Definimos

$$H_0^{\Gamma} = H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla; \mathbf{k} = \Gamma) = \frac{p^{(op)2}}{2m_e} + V_{e-rede}(\mathbf{r}). \quad (2.19)$$

Assim, os autoestados de  $H_0^{\Gamma}$  são estados de Bloch que levam em conta as propriedades de simetria do ponto  $\Gamma$ ; nesse ponto, os estados de condução possuem simetria esférica (equivalente a um orbital atômico do tipo  $s$ ) e o autovalor da energia correspondente ao topo da banda de valência é degenerado com relação aos autoestados que, por sua vez, possuem simetrias equivalentes aos orbitais atômicos  $p_x$ ,  $p_y$  e  $p_z$  (YU; CARDONA, 1996).

O modelo de Kane (KANE, 1982) restringe os estados da base  $\{u_{\ell\Gamma}(\mathbf{r})\}$  ao subespaço  $\{|S\rangle, |X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$ ; o *ket*  $|S\rangle$  indica um estado com a simetria de um orbital do tipo  $s$ , os estados  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$  e  $|Z\rangle$  possuem, respectivamente, as mesmas simetrias dos orbitais  $p_x$ ,  $p_y$  e  $p_z$ . Considere a seguinte notação para base acima descrita:  $\{|\ell\rangle\}$  (onde  $\ell = S, X, Y, Z$ ); então, vamos fixar os autovalores no ponto  $\Gamma$  da seguinte forma:  $\ell = S$  é autoestado de  $H_0^{\Gamma}$  com energia correspondente ao ponto de mínimo da banda de condução ( $E_{\ell=X}(\Gamma) \equiv E_c$ ),  $\ell = X, Y, Z$  são autoestados degenerados de  $H_0^{\Gamma}$  com energia correspondente ao ponto de máximo da banda de valência ( $E_{\ell=X,Y,Z}(\Gamma) \equiv E_v$ ). Portanto, a ação de  $H_0^{\Gamma}$  sobre os estados da base  $\{|\ell\rangle\}$  será tal que

$$H_0^{\Gamma}|S\rangle = E_c|S\rangle \quad (2.20)$$

e

$$H_0^{\Gamma}|\ell\rangle = E_v|\ell\rangle \quad (2.21)$$

se  $\ell = X, Y, Z$ . A base em questão deve ser ortonormal, ou seja

$$\langle \ell | H_0^{\Gamma} | j \rangle = \begin{cases} E_c \delta_{\ell j} & \text{se } j = S, \\ E_v \delta_{\ell j} & \text{se } j = X, Y, Z. \end{cases} \quad (2.22)$$

Se queremos obter a representação matricial de  $H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla; \mathbf{k})$  (dado pela Eq. 2.16) na base  $\{|\ell\rangle\}$ , inicialmente devemos obter os elementos de matriz  $\langle j|\mathbf{p}^{(op)}|\ell\rangle$ . Para tanto, considere o operador

$$\mathbf{p}^{(op)} = -i\hbar(\mathbf{e}_x\partial_x + \mathbf{e}_y\partial_y + \mathbf{e}_z\partial_z) \quad (2.23)$$

e sua atuação sobre a base  $\{|\ell\rangle\}$ . Com efeito,

$$\mathbf{p}^{(op)}|X\rangle = -i\hbar\partial_x|X\rangle\mathbf{e}_x = p_x^{(op)}|X\rangle\mathbf{e}_x, \quad (2.24)$$

pois a simetria dos estados da base é tal que  $\partial_x\langle\mathbf{r}|Y\rangle = \partial_x\langle\mathbf{r}|Z\rangle = 0$ . De forma análoga teremos  $\mathbf{p}^{(op)}|Y\rangle = p_y^{(op)}|Y\rangle\mathbf{e}_y$  e  $\mathbf{p}^{(op)}|Z\rangle = p_z^{(op)}|Z\rangle\mathbf{e}_z$ , os elementos de matriz não nulos serão:  $\langle S|\mathbf{p}^{(op)}|X\rangle = \langle S|p_x^{(op)}|X\rangle\mathbf{e}_x$ ,  $\langle S|\mathbf{p}^{(op)}|Y\rangle = \langle S|p_y^{(op)}|Y\rangle\mathbf{e}_y$  e  $\langle S|\mathbf{p}^{(op)}|Z\rangle = \langle S|p_z^{(op)}|Z\rangle\mathbf{e}_z$  com  $\langle j|\mathbf{p}^{(op)}|\ell\rangle = \langle\ell|\mathbf{p}^{(op)}|j\rangle^*$ . Os integrais seguintes assumirão um valor bem conhecido (KANE, 1982; BASTARD, 1988; YU; CARDONA, 1996; DAVIES, 1998):

$$\langle S|p_x^{(op)}|X\rangle = \langle S|p_y^{(op)}|Y\rangle = \langle S|p_z^{(op)}|Z\rangle = i\frac{m_e}{\hbar}\sqrt{\frac{3}{2}}P. \quad (2.25)$$

Então, considere a expansão na base  $\{|\ell\rangle\}$  como solução para a Eq. 2.15, ou seja,

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=S,X,Y,Z} a_\ell|\ell\rangle. \quad (2.26)$$

Substituindo a expansão acima na Eq. 2.15 e projetando o resultado obtido sobre um estado qualquer ( $|j\rangle$ ) pertencente à base, teremos

$$\sum_{\ell=S,X,Y,Z} \left\{ \left[ E_\ell(\Gamma) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - E_n(\mathbf{k}) \right] \delta_{j\ell} + \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{k} \cdot \langle j|\mathbf{p}^{(op)}|\ell\rangle \right\} a_\ell = 0, \quad (2.27)$$

de onde segue o seguinte sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} E_c + \epsilon_k - E_n(\mathbf{k}) & i\sqrt{3/2}Pk_x & i\sqrt{3/2}Pk_y & i\sqrt{3/2}Pk_z \\ -i\sqrt{3/2}Pk_x & E_v + \epsilon_k - E_n(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ -i\sqrt{3/2}Pk_y & 0 & E_v + \epsilon_k - E_n(\mathbf{k}) & 0 \\ -i\sqrt{3/2}Pk_z & 0 & 0 & E_v + \epsilon_k - E_n(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_s \\ a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

onde, por conveniência, denotamos  $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ . Esse sistema de equações pode ser solucionado através de um procedimento muito simples (isto é, facilmente determinamos os autovalores  $E_n(\mathbf{k})$ ). Das três últimas equações, obtemos  $a_x$ ,  $a_y$  e  $a_z$  em função de  $a_s$ , em seguida, os resultados obtidos são substituídos na primeira equação do referido sistema.

Os autovalores encontrados são

$$E_{n=CB}(k) = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{1}{2}\sqrt{(E_c - E_v)^2 + 6P^2k^2} + \frac{\hbar^2k^2}{2m_e}, \quad (2.28)$$

$$E_{n=LH}(k) = \frac{1}{2}(E_c + E_v) - \frac{1}{2}\sqrt{(E_c - E_v)^2 + 6P^2k^2} + \frac{\hbar^2k^2}{2m_e} \quad (2.29)$$

e

$$E_{n=HH}(k) = \frac{\hbar^2k^2}{2m_e}. \quad (2.30)$$

Os índices CB, LH e HH são atribuídos em função da interpretação física desses autovalores, no contexto da aproximação de massa efetiva. Observe que, para pequenos valores de  $k$ , podemos expandir os autovalores  $E_n(k)$  em séries de Taylor, ou seja,

$$E_n(k) = E_n(0) + \frac{\partial}{\partial k}E_n(0)k + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2}{\partial k^2}E_n(0)k^2 + \dots + \frac{1}{N!}\frac{\partial^N}{\partial k^N}E_n(0)k^N + \dots \quad (2.31)$$

e, considerando os termos até segunda ordem em  $k$ , das Eqs. 2.28, 2.29 e 2.30 teremos

$$E_{CB}(k) = E_c + \frac{\hbar^2k^2}{2m_e} \left( 1 + 3\frac{m_eP^2}{\hbar^2E_g} \right), \quad (2.32)$$

$$E_{LH}(k) = E_v + \frac{\hbar^2k^2}{2m_e} \left( 1 - 3\frac{m_eP^2}{\hbar^2E_g} \right) \quad (2.33)$$

e

$$E_{HH}(k) = \frac{\hbar^2k^2}{2m_e}, \quad (2.34)$$

onde definimos  $E_g = E_c - E_v$ . Observe que, assumindo pequenos valores de  $k$ , as bandas CB, LH e HH apresentam dispersões semelhantes ao de uma partícula livre, onde a massa efetiva fica definida, para cada banda, a partir da seguinte relação:

$$\frac{1}{m_{eff}} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{\partial^2 E_n}{\partial k^2} \right)_{k=0}. \quad (2.35)$$

Assim, das Eqs. 2.32, 2.33 e 2.34, temos

$$\frac{1}{m_{CB}} = \frac{1}{m_e} \left( 1 + 3\frac{m_eP^2}{\hbar^2E_g} \right), \quad \frac{1}{m_{LH}} = \frac{1}{m_e} \left( 1 - 3\frac{m_eP^2}{\hbar^2E_g} \right) \quad (2.36)$$

e  $m_{HH} = m_e$ . Os integrais que permitem obter o valor de  $P$  são estimados de acordo com a seguinte relação:  $E_p = \frac{3}{2}\frac{2m_e}{\hbar^2}P^2$ , onde temos  $E_p = 22 \text{ eV}$  para o *GaAs*. Para diferentes ligas semicondutoras, o valor de  $E_p$  apresenta uma pequena variação<sup>3</sup> (DAVIES, 1998).

---

<sup>3</sup>Contudo, quando tratamos de heteroestruturas semicondutoras compostas por diferentes ligas, uma das aproximações mais utilizadas consiste em fixar o valor de  $P$  de acordo com o material do poço.



Então, conhecendo o *gap* de energia para a liga em questão, o modelo de Kane com três bandas permite obter resultados esclarecedores do ponto de vista dos conceitos físicos envolvidos. Por exemplo, assumindo  $E_g = 1.5\text{ eV}$  para a liga (binária) *GaAs*, obtemos os seguintes resultados:  $m_{CB} = 0.061m_e$ ,  $m_{LH} = -0.073m_e$  e  $m_{HH} = m_e$ . Assim, podemos distinguir as massas efetivas para estados de condução ( $m_{CB}$ ), para buracos leves ( $m_{LH}$ ) e para buracos pesados ( $m_{HH}$ ), de forma que a massa efetiva negativa é característica da relação de dispersão para buracos e, embora a relação de dispersão para buracos pesados não seja adequadamente descrita pelo modelo em questão<sup>4</sup>, os buracos pesados, além de apresentarem uma massa efetiva negativa, são caracterizados por uma massa efetiva cujo módulo é consideravelmente maior quando comparado à  $m_{CB}$  e  $m_{LH}$  (como pode ser verificado, por exemplo, no caso do *GaAs*, onde os valores das massas efetivas são bem estabelecidos, isto é,  $m_{CB} = 0.067m_e$ ,  $|m_{LH}| = 0.082m_e$  e  $|m_{HH}| = 0.5m_e$ ).

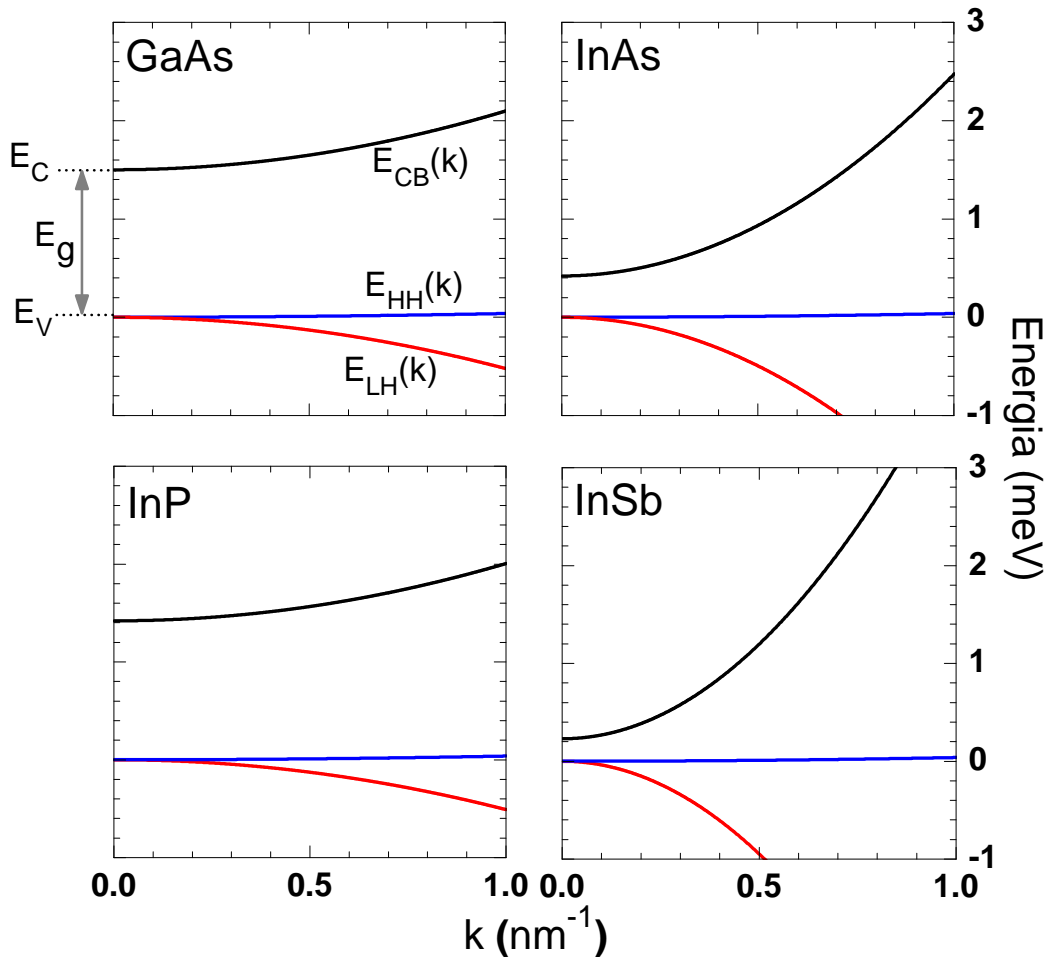


Figura 2.2 - Resultados obtidos com o modelo de Kane de três bandas (CB, LH e HH). Assumimos  $E_g = 1.5\text{ eV}$  para o GaAs,  $E_g = 1.42\text{ eV}$  para o InP,  $E_g = 0.42\text{ eV}$  para o InAs e  $E_g = 0.23\text{ eV}$  para o InSb.

<sup>4</sup>Pois, para esses estados, perde-se a informação sobre a renormalização da massa.

## 2.5 Efeito da interação spin-órbita

Nesta seção, ainda no contexto do modelo de Kane, vamos discutir a influência da interação spin-órbita sobre a estrutura eletrônica do *bulk*. No caso de semicondutores que possuem uma estrutura cristalina do tipo *zinc blende*, a interação SO é responsável pela remoção parcial da degenerescência da banda de valência no ponto  $\Gamma$ . Nesse ponto, a banda de valência permanece degenerada em relação aos estados conhecidos como *light hole* (LH) e *heavy hole* (HH), entretanto, sua degenerescência é parcialmente removida e um terceiro autovalor para a energia é obtido quando consideramos o sistema sob a influência da interação SO (isto é, quando levamos em conta o termo de interação SO no hamiltoniano que descreve o sistema). Conforme discutido, considerando estados eletrônicos no limite de baixas energias (como, de forma geral, o espectro composto pelas energias permitidas para elétrons em sólidos cristalinos), a correção relativística de primeira ordem em  $1/c^2$ , conhecida como interação SO, é tal que

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m_e^2c^2} (\nabla V \times \mathbf{p}^{(op)}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.37)$$

onde  $\boldsymbol{\sigma}$  é o operador de Pauli e suas componentes são representadas por matrizes (conhecidas como matrizes de Pauli). Na base dos autoestados de  $\sigma_y$ , essas matrizes são

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

Por conveniência, defina

$$\mathbf{h}^{so} = \frac{\hbar}{4m_e^2c^2} \nabla V \times \mathbf{p}^{(op)} = h_x^{so} \mathbf{e}_x + h_y^{so} \mathbf{e}_y + h_z^{so} \mathbf{e}_z. \quad (2.38)$$

Assim,  $H_{SO}$  terá a seguinte representação matricial

$$H_{SO} = \begin{bmatrix} h_y^{so} & h_z^{so} - ih_x^{so} \\ h_z^{so} + ih_x^{so} & -h_y^{so} \end{bmatrix}.$$

Estamos interessados nos autovalores e autoestados do hamiltoniano dado por  $H_0^\Gamma + H_{SO}$ . Considere a representação matricial de  $H_0^\Gamma + H_{SO}$  na base formada pelos autoestados de  $H_0^\Gamma$  (evidente que, nessa base, a representação matricial de  $H_0^\Gamma$  é diagonal), ou seja,

$$\begin{bmatrix} H_0^\Gamma + h_y^{so} & h_z^{so} - ih_x^{so} \\ h_z^{so} + ih_x^{so} & H_0^\Gamma - h_y^{so} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b(\mathbf{r}) \\ c(\mathbf{r}) \end{bmatrix} = \mathbf{1}E \begin{bmatrix} b(\mathbf{r}) \\ c(\mathbf{r}) \end{bmatrix}.$$

Então, denotando as componentes  $b(\mathbf{r})$  e  $c(\mathbf{r})$  como combinação linear dos estados da base  $\{|S\rangle, |X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$ , segue que

$$b(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=S,X,Y,Z} b_\ell |\ell\rangle \quad \text{e} \quad c(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=S,X,Y,Z} c_\ell |\ell\rangle. \quad (2.39)$$

Teremos, portanto, o sistema de equações

$$\sum_{\ell=S,X,Y,Z} \left[ (H_0^\Gamma + h_y^{so}) b_\ell + (h_z^{so} - ih_x^{so}) c_\ell \right] |\ell\rangle = E \sum_{\ell=S,X,Y,Z} b_\ell |\ell\rangle \quad (2.40)$$

$$\sum_{\ell=S,X,Y,Z} \left[ (h_z^{so} + ih_x^{so}) b_\ell + (H_0^\Gamma - h_y^{so}) c_\ell \right] |\ell\rangle = E \sum_{\ell=S,X,Y,Z} c_\ell |\ell\rangle. \quad (2.41)$$

A simetria dos elementos de matriz é tal que  $\langle X|h_y^{so}|Z\rangle = \langle Y|h_z^{so}|X\rangle = \langle Z|h_x^{so}|Y\rangle$ . Então, fica caracterizado o terceiro autovalor para a energia no ponto  $\Gamma$ , associado à interação SO, conforme segue

$$\Delta = -3i\langle X|h_y^{so}|Z\rangle = -3i\frac{\hbar}{4m_e^2c^2}\langle X|(\nabla V \times \mathbf{p}^{(op)})_y|Z\rangle. \quad (2.42)$$

As Eqs. 2.40 e 2.41 podem ser expressas pelo seguinte sistema

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

ou, equivalentemente,

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

Tabela 2.1 - Autovalores no ponto  $\Gamma$  e as correspondentes autofunções.

$E(\mathbf{k} = \Gamma)$	$ n, \mathbf{k} = \Gamma, \sigma_y\rangle$	$u_{n\Gamma}^\sigma(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}   n, \mathbf{k} = \Gamma, \sigma_y \rangle$
$E_c$	$ CB \uparrow\rangle$	$ S \uparrow\rangle$
	$ CB \downarrow\rangle$	$ -S \downarrow\rangle$
$E'_v - \Delta$	$ SO \uparrow\rangle$	$ -(1/3)^{1/2}[Y \downarrow - (Z - iX) \uparrow]\rangle$
	$ SO \downarrow\rangle$	$ -(1/3)^{1/2}[Y \uparrow + (Z + iX) \downarrow]\rangle$
$E'_v$	$ HH \uparrow\rangle$	$ -(1/2)^{1/2}(Y \downarrow - iX \uparrow)\rangle$
	$ LH \uparrow\rangle$	$ (2/3)^{1/2}Z \uparrow + (1/6)^{1/2}(Y \downarrow + iX \uparrow)\rangle$
	$ LH \downarrow\rangle$	$ -(2/3)^{1/2}Z \downarrow + (1/6)^{1/2}(Y \uparrow + iX \downarrow)\rangle$
	$ HH \downarrow\rangle$	$ -(1/2)^{1/2}(Y \uparrow - iX \downarrow)\rangle$

Como a representação matricial para  $H_0^\Gamma + H_{SO}$  é diagonal por blocos, podemos obter os autovalores e autoestados para cada bloco separadamente. A Tabela 2.1 mostra os autovalores e os correspondentes autoestados obtidos para cada bloco. Os autovalores obtidos são  $E = E_c$ ,  $E = E'_v$  e  $E = E'_v - \Delta$  e correspondem respectivamente às energias permitidas (considerando  $k = 0$ , ou seja, no ponto  $\Gamma$ ) para elétrons nas bandas de condução, valência e *split-off* (SO). Observe que, por simplicidade, redefinimos o autovalor para a banda de valência, ou seja,  $E'_v = E_v + \Delta/3$ , onde  $\Delta$  representa a separação de energia entre a banda de valência e o nível conhecido como *split-off*. Note que, no ponto  $\Gamma$ , todos os autovalores são degenerados. Entretanto, para pequenos valores de  $\mathbf{k}$ , essa degenerescência é completamente removida e teremos, como consequência, oito bandas de energia. Podemos explorar esse efeito, utilizando o formalismo previamente desenvolvido. Para tanto, vamos calcular os seguintes elementos de matriz:

$$[H_{\mathbf{k}\mathbf{p}}^{8 \times 8}]_{nn'} = \langle n, \mathbf{k} = \Gamma, \sigma_y | (H_0^\Gamma + H_{SO} + \frac{\hbar}{m_e} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}^{(op)}) | n', \mathbf{k} = \Gamma, \sigma'_y \rangle. \quad (2.43)$$

Como resultado, temos o hamiltoniano  $8 \times 8$  mostrado na Tabela 2.2 (presente na próxima página), onde os elementos de matriz não nulos do operador momentum, calculados na base mostrada na Tabela 2.1, isto é,  $\mathbf{p}_{nn'}^{(op)} = \langle n, \mathbf{k} = \Gamma, \sigma_y | \mathbf{p}^{(op)} | n', \mathbf{k} = \Gamma, \sigma'_y \rangle$  (com  $\mathbf{p}_{nn'}^{(op)} = \mathbf{p}_{n'n}^{(op)*}$ ), são tais que:

$(\hbar/m_e)\mathbf{p}_{nn'}^{(op)}$	$ LH \uparrow\rangle$	$ HH \uparrow\rangle$	$ SO \uparrow\rangle$	$ LH \downarrow\rangle$	$ HH \downarrow\rangle$	$ SO \downarrow\rangle$
$\langle CB \uparrow  $	$P(i\mathbf{e}_z - \frac{1}{2}\mathbf{e}_x)$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}P\mathbf{e}_x$	$\frac{P}{\sqrt{2}}(i\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_x)$	$i\frac{P}{2}\mathbf{e}_y$	$-i\frac{\sqrt{3}}{2}P\mathbf{e}_y$	$-i\frac{P}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_y$
$\langle CB \downarrow  $	$-i\frac{P}{2}\mathbf{e}_y$	$i\frac{\sqrt{3}}{2}P\mathbf{e}_y$	$i\frac{P}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_y$	$P(i\mathbf{e}_z + \frac{1}{2}\mathbf{e}_x)$	$\frac{\sqrt{3}}{2}P\mathbf{e}_x$	$\frac{P}{\sqrt{2}}(i\mathbf{e}_z - \mathbf{e}_x)$

Tabela 2.2 - Elementos de matriz  $[H_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{8 \times 8}]_{nm}$  calculados na base  $\{|n, \mathbf{k} = \Gamma, \sigma_y\rangle\}$ .

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



### 3 EFEITO ZEEMAN

No efeito Zeeman, quando um átomo está sob a influência de um campo magnético externo uniforme, digamos  $\mathbf{B}$ , cada componente do espectro atômico desdobra-se num certo número de linhas equidistantes. Sabe-se que o espaçamento entre essas linhas é proporcional à intensidade de  $\mathbf{B}$  e que essa relação de proporcionalidade é determinada pelo fator  $g$  de spin. Denotando por  $g_e$  o fator  $g$  de spin para um elétron no vácuo, a formulação relativista da mecânica quântica prediz que  $g_e = 2$ , entretanto, esse valor apresenta ainda uma pequena correção dada em termos da interação do elétron com seu próprio campo de radiação. Por outro lado, para portadores de carga e de spin em semicondutores, o fator  $g$  é fortemente renormalizado pelos efeitos da estrutura de bandas, ou seja, assim como ocorre com a massa dos portadores, o fator  $g$  é corrigido em função da interação do portador com a rede cristalina, passando a ser conhecido como fator  $g$  efetivo e denotado por  $g^*$ . Entre os semicondutores III-V,  $g^*$  pode variar, por exemplo, de  $\sim -0,5$  no GaAs para  $\sim -50$  no InSb. Tal variação pode ser explicada através da célebre fórmula de Roth

$$g^* = g_e - \frac{m_e}{m^*} \frac{2\Delta}{3E_g + 2\Delta}. \quad (3.1)$$

A expressão acima foi obtida por Roth, Lax e Zwerdling (ROTH et al., 1959) através da teoria de perturbação  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  de segunda ordem e corresponde à solução exata para o modelo de Kane considerando a energia no fundo da banda de condução (KIM et al., 1989). Em nanoestruturas semicondutoras, o fator  $g$  efetivo é também renormalizado pelo potencial de confinamento, podendo ser modulado de acordo com a geometria do potencial assim como pela escolha dos materiais que compõem a nanoestrutura. A possibilidade de produzir nanoestruturas que favoreçam a manipulação do fator  $g$  efetivo através do confinamento dos portadores e da decorrente quantização dos estados permitidos é de grande interesse ao desenvolvimento da spintrônica (ZUTIC et al., 2004). Ao longo das últimas décadas, o fator  $g$  efetivo para elétrons confinados em poços quânticos tem sido tema central de um grande número de estudos, onde tanto os resultados 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 os resultados teóricos (IVCHENKO; KISELEV, 1992; IVCHENKO et al., 1997; KISELEV et al., 1998; KISELEV et al., 1999; KOTLYAR et al., 2001; DIOS-LEYVA et al., 2006; PFEFFER; ZAWADZKI, 2006; BRUNO-ALFONSO et al., 2010) proporcionaram um avanço significativo. Houve um grande avanço na compreensão da relação entre os efeitos do confinamento eletrônico e o correspondente valor associado ao fator  $g$ . Por exemplo, a dependência do fator  $g$  com a largura do poço quântico, assim como a influência dos materiais que o compõem, são algumas das questões que foram exaustivamente exploradas.

Entretanto, sabe-se que  $g_{QW}^*$  apresenta uma anisotropia cuja origem não foi ainda completamente compreendida. Essa anisotropia é definida a partir das diferentes configurações que um campo magnético externo pode assumir em relação às duas direções espaciais determinadas pela geometria de um poço quântico<sup>1</sup>, ou seja, paralela e perpendicular à interface do poço (como mostrado na Fig 3.1). Tal efeito foi inicialmente interpretado por Ivchenko e Kiselev (IVCHENKO; KISELEV, 1992) como resultado da diferença entre as massas dos buracos leves e pesados. Contudo, sabe-se que o modelo de Kane não é adequado à descrição das bandas em questão. Além disso, nas últimas décadas, surgiram fortes indícios de que tal anisotropia pode ter uma conexão direta com o efeito Rashba (WILAMOWSKI et al., 2002; ZHANG et al., 2004; SOUSA et al., 2011).

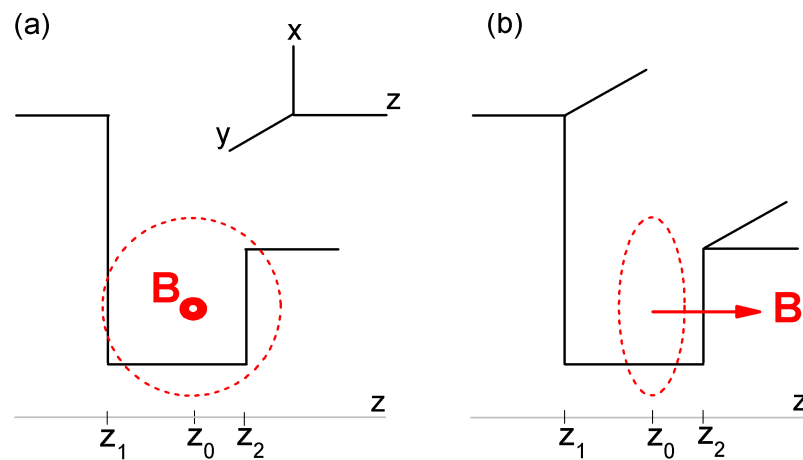


Figura 3.1 - (a) Ilustra o perfil da banda de condução na direção de crescimento (escolhida no eixo  $z$ ) e o campo magnético externo paralelo à interface entre os materiais. A figura descreve a trajetória clássica dos elétrons através das interfaces do poço. (b) Já no caso em que o campo é aplicado na direção perpendicular à interface, os elétrons percorrem órbitas sobre uma região espacialmente homogênea (sem interfaces) e o acoplamento Rashba não contribui para o hamiltoniano efetivo.

Utilizando uma extensão do formalismo que foi desenvolvido no capítulo anterior, vamos mostrar que, para a situação ilustrada na Fig. 3.1 (a), o acoplamento Rashba contribui com dois termos sobre o hamiltoniano efetivo para elétrons, sendo um dos termos finito mesmo para estruturas que apresentam simetria de inversão espacial. Por outro lado, para a configuração mostrada na Fig. 3.1 (b), onde temos o campo magnético externo alinhado com a direção de crescimento (ou seja,  $\mathbf{B}$  é perpendicular à interface), é possível mostrar que o termo de Rashba não apresenta contribuição para o hamiltoniano efetivo e, portanto, nessa situação, o fator  $g$  de spin é renormalizado apenas pela contribuição do *bulk*. Assim, de acordo com nosso modelo, o acoplamento Rashba é responsável pela anisotropia apresentada pelo fator  $g$  efetivo para elétrons confinados em poços quânticos.

<sup>1</sup>Conforme veremos na próxima seção, a geometria do poço quântico favorece uma determinada escolha para o sistema de coordenadas que estamos utilizando. Em particular, sabe-se que no plano paralelo à interface, fica preservada a simetria de translação do cristal, esse plano define um conjunto infinito de direções fisicamente equivalentes. A direção de crescimento é perpendicular à interface e define o eixo  $z$ .



### 3.1 Aproximação de função envelope

No capítulo anterior, vimos que o teorema de Bloch permite estudar os autoestados para o hamiltoniano associado a uma estrutura cristalina perfeita<sup>2</sup>. A aproximação de função envelope descreve os auto-estados para o Hamiltoniano associado a uma heteroestrutura semicondutora, onde ocorre a quebra da simetria de translação da rede devido à descontinuidade do potencial de condução na direção de crescimento. A aproximação de função envelope pode ser obtida como uma adaptação da teoria de massa efetiva ao problema de impurezas (LUTTINGER; KOHN, 1955) e nanoestruturas (BASTARD, 1988; DAVIES, 1998) para os quais o potencial associado varia lentamente em relação ao parâmetro de rede de forma que pode ser considerado constante sobre o volume de uma célula unitária. Para o caso mostrado na Fig. 3.1, em que a simetria de translação é removida em apenas uma direção, digamos  $z$ , o plano  $x - y$  permanecerá espacialmente caracterizado pela simetria de translação do cristal e, portanto, a função de onda poderá ser escrita como um produto entre uma onda plana restrita ao plano  $x - y$  e a combinação linear dos estados de *bulk* que formam a base  $\{u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$  mostrada na Tab. 2.1:

$$\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}} \sum_{n,\sigma} f_n^{\sigma}(z) u_{n\Gamma}^{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (3.2)$$

onde  $n$  identifica a banda, o coeficiente  $f_n(z)$  é a chamada função envelope para a  $n$ -ésima banda,  $\mathbf{k}_{\parallel} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$  é o vetor de onda restrito ao plano paralelo à interface entre os diferentes materiais e  $\sigma$  é o número quântico associado ao spin do portador. Então, considerando que os portadores estejam sob a influência de um potencial que varia em escala mesoscópica  $v(z)$ , devemos procurar pela solução da seguinte equação:

$$\left[ \frac{p^{(op)2}}{2m_e} + V_{e-rede}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} (\nabla V \times \mathbf{p}^{(op)}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + v(z) \right] \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\sigma}(\mathbf{k}_{\parallel}) \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}). \quad (3.3)$$

Ao proceder com as operações para a equação acima, pode ser de grande utilidade levar em conta a simetria axial que caracteriza a heteroestrutura e, além das escolhas do eixo  $z$  como direção de crescimento e  $y$  como direção de quantização do spin, mostra-se conveniente a escolha do vetor de onda no plano ao longo do eixo  $x$  (MARQUES; SHAM, 1982; GERCHIKOV; SUBASHIEV, 1992; SILVA et al., 1994). Assim, a Eq. 3.3 assume a representação matricial diagonal por blocos

$$\begin{bmatrix} H_{eff\uparrow}^{4 \times 4}(z, -id/dz) - 1^{4 \times 4} \varepsilon_{\uparrow}(k_{\parallel}) & 0^{4 \times 4} \\ 0^{4 \times 4} & H_{eff\downarrow}^{4 \times 4}(z, -id/dz) - 1^{4 \times 4} \varepsilon_{\downarrow}(k_{\parallel}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\uparrow} \\ \mathbf{F}_{\downarrow} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0^{4 \times 1} \\ 0^{4 \times 1} \end{bmatrix}.$$

<sup>2</sup>Isto é,  $H_{Bloch}(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla) = p^{(op)2}/2m_e + V_{e-rede}(\mathbf{r})$  onde  $V_{e-rede}(\mathbf{r}) = V_{e-rede}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ .

É importante notar que a aproximação de função envelope escrita de acordo com a Eq. 3.2, considera a conservação da componente do momento linear no plano  $x-y$ , de forma que  $\mathbf{k}_{\parallel}$  representa, para esse sistema, um bom número quântico. Por outro lado, com a quebra da simetria de translação na direção de crescimento, a componente  $z$  do momentum assume a condição de operador, isto é,  $k_z \rightarrow -id/dz$ , e os parâmetros que caracterizam o *bulk* (ou seja,  $m^*$ ,  $E_g$  e  $\Delta$ ) mudam abruptamente de valor sobre a interface entre os diferentes materiais; por conseguinte, os perfis das bandas de condução  $E_c(z)$ , valência  $E_v(z)$  e *split-off*  $\Delta(z)$  são, ao longo da direção de crescimento, modulados pela função degrau. Com isso, o hamiltoniano de massa efetiva de oito bandas, denotado por  $H_{eff}^{8 \times 8}(z, -id/dz)$ , é obtido à semelhança de  $H_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}^{8 \times 8}$  mostrado na Tab. 2.2, isto é,

$$H_{eff}^{4 \times 4} = \begin{array}{c|cccc} & |CB \uparrow\downarrow\rangle & |LH \uparrow\downarrow\rangle & |HH \uparrow\downarrow\rangle & |SO \uparrow\downarrow\rangle \\ \hline \langle CB \uparrow\downarrow | & E_c(z) + v(z) & P \left( \frac{d}{dz} \mp \frac{k_x}{2} \right) & \mp \frac{\sqrt{3}}{2} P k_x & \frac{P}{\sqrt{2}} \left( \frac{d}{dz} \pm k_x \right) \\ \langle LH \uparrow\downarrow | & P \left( -\frac{d}{dz} \mp \frac{k_x}{2} \right) & E_v(z) + v(z) & 0 & 0 \\ \langle HH \uparrow\downarrow | & \mp \frac{\sqrt{3}}{2} P k_x & 0 & E_v(z) + v(z) & 0 \\ \langle SO \uparrow\downarrow | & \frac{P}{\sqrt{2}} \left( -\frac{d}{dz} \pm k_x \right) & 0 & 0 & E_v(z) - \Delta(z) + v(z) \end{array}$$

Assim, vemos que a Eq. 3.3 pode ser representada por um sistema de equações acopladas; a presente representação matricial permite obter as componentes  $f_{HH}^{\uparrow\downarrow}(z)$ ,  $f_{LH}^{\uparrow\downarrow}(z)$  e  $f_{SO}^{\uparrow\downarrow}(z)$  em função da componente  $f_{CB}^{\uparrow\downarrow}(z)$ :

$$\mathbf{F}_{\uparrow\downarrow} = \begin{bmatrix} f_{CB}^{\uparrow\downarrow} \\ \frac{-P}{\varepsilon_{\uparrow\downarrow} - E_v(z) - v(z)} \left( \frac{d}{dz} \pm \frac{k_x}{2} \right) f_{CB}^{\uparrow\downarrow} \\ \mp \frac{\sqrt{3} P k_x}{2[\varepsilon_{\uparrow\downarrow} - E_v(z) - v(z)]} f_{CB}^{\uparrow\downarrow} \\ \frac{-P}{\sqrt{2}[\varepsilon_{\uparrow\downarrow} - E_v(z) - v(z) + \Delta(z)]} \left( \frac{d}{dz} \mp k_x \right) f_{CB}^{\uparrow\downarrow} \end{bmatrix}.$$

Efetuada a operação de  $H_{eff}^{4 \times 4}$  sobre  $\mathbf{F}_{\uparrow\downarrow}$ , imediatamente obtemos a equação de massa efetiva desacoplada para estados de condução, ou seja, restrita ao subespaço  $\{|CB \uparrow\downarrow\rangle\}$ .

### 3.2 Massa e fator g efetivos

Considere a situação ilustrada na Fig. 3.1 (a), onde um campo magnético externo uniforme está direcionado de forma paralela à interface do poço. Nessa situação, podemos escolher  $\mathbf{B} = (0, B, 0)$  e proceder conforme Brozak *et al.* (BROZAK *et al.*, 1990), utilizando o calibre de Landau  $\mathbf{A} = Bz \mathbf{e}_x$  e a substituição fundamental  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}$  ( $-e$  é a carga do elétron). Efetuando a projeção da equação de massa efetiva sobre os estados de condução, temos

$$H_{CB}^{(\sigma)}(z, \varepsilon_\sigma) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon_\sigma)} \frac{d}{dz} + \frac{1}{2} \frac{m_e^2}{m(z, \varepsilon_\sigma)} \omega_c^2 (z - z_0)^2 + E_c(z) + v(z) - \frac{1}{2} \frac{4m_e}{\hbar^2} \left[ \alpha_R(z, \varepsilon_\sigma) (z - z_0) + \eta(z, \varepsilon_\sigma) \right] \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (3.4)$$

com  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \pm B$  (ou seja,  $\sigma = \pm$ ), observe que  $z_0 = -l^2 k_x$  define a posição do centro da órbita (onde  $l = \sqrt{\hbar/eB}$  é o comprimento magnético),  $\omega_c = eB/m_e$  é a frequência de ciclotron para o elétron e  $\alpha_R(z, \varepsilon_\sigma) = \frac{d}{dz} \eta(z, \varepsilon_\sigma)$  é o parâmetro de acoplamento Rashba. Os termos  $m(z, \varepsilon_\sigma)$  e  $\eta(z, \varepsilon_\sigma)$  são descritos segundo as expressões:

$$\frac{1}{m(z, \varepsilon_\sigma)} = \frac{P^2}{\hbar^2} \left[ \frac{2}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z)} + \frac{1}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z) + \Delta(z)} \right] \quad (3.5)$$

e

$$\eta(z, \varepsilon_\sigma) = \frac{P^2}{2} \left[ \frac{1}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z)} - \frac{1}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z) + \Delta(z)} \right] \quad (3.6)$$

onde  $P$  é dado pela Eq. 2.25. O Hamiltoniano de massa efetiva 3.4 permite definir um fator  $g$  de spin efetivo para estados de condução; observe que seu valor depende da interação do elétron com a rede cristalina e do potencial de confinamento (através do acoplamento Rashba). Veremos, por meio da teoria de perturbação de primeira ordem, que os (dois) termos oriundos do acoplamento Rashba apresentam comportamentos distintos, sendo que um deles contribui para o cálculo do fator  $g$  efetivo mesmo no caso de heteroestruturas providas de um centro de inversão no espaço. O formalismo aqui desenvolvido também permite reproduzir alguns resultados de modelos conhecidos na literatura. Por exemplo, no limite de campo magnético nulo, o sistema restaura a simetria de translação no plano  $x - y$  e o Hamiltoniano 3.4 ficará, de maneira usual, reduzido ao hamiltoniano de Rashba (GERCHIKOV; SUBASHIEV, 1992; SILVA *et al.*, 1994; SILVA *et al.*, 1997). Na ausência da interação SO (ou seja,  $\Delta = 0$ ), recuperamos os níveis de Landau como solução da equação de massa efetiva resultante (BROZAK *et al.*, 1990). No limite de *bulk*, recuperamos o modelo de Kane não-parabólico, onde o efeito Zeeman é renormalizado apenas pela interação do elétron com o rede cristalina (KIM *et al.*, 1989). A fórmula de Roth é reproduzida no limite de *bulk*, basta fixar o valor da energia no fundo da banda de condução (ROTH *et al.*, 1959).

Definindo o fator  $g$  de spin efetivo para estados de condução a partir do hamiltoniano de massa efetiva dado pela Eq. 3.4, podemos obter resultados de nosso interesse por meio da teoria de perturbação de primeira ordem. Considerando a equação de ordem zero tal que

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon)} \frac{d}{dz} + E_c(z) + v(z) \right] f^{(0)}(z) = \varepsilon_0 f^{(0)}(z), \quad (3.7)$$

o fator  $g$  efetivo pode ser obtido em termos das autofunções  $f^{(0)}(z)$  e dos autovalores  $\varepsilon_0$ :

$$g_{QW}^* = g_e - \langle f^{(0)} | g_{bulk}(z, \varepsilon_0) | f^{(0)} \rangle - \frac{4m_e}{\hbar^2} \langle f^{(0)} | \alpha_R(z, \varepsilon_0)(z - z_0) | f^{(0)} \rangle \quad (3.8)$$

com

$$g_{bulk}(z, \varepsilon_0) = \frac{4m_e}{\hbar^2} \eta(z, \varepsilon_0) + \delta g_{rem}, \quad (3.9)$$

onde  $g_e \approx 2$  é o fator  $g$  de spin para o elétron no vácuo e  $\delta g_{rem}$  denota a contribuição de bandas remotas<sup>3</sup> (além daquelas consideradas pelo modelo de Kane de oito bandas). As Eqs. 3.4 e 3.8 consideram o campo magnético externo paralelo à interface do poço. Entretanto, na situação em que temos o campo magnético externo alinhado com a direção de crescimento (situação em que  $\mathbf{B}$  é perpendicular à interface), o sistema deve preservar a simetria de rotação em torno do eixo  $z$ . Em uma análise semiclássica, os elétrons percorrem trajetórias sobre uma região especialmente homogênea (como ilustrado na Fig. 3.1 (b)), situação para qual o acoplamento Rashba não apresenta contribuição sobre o fator  $g$ . Portanto<sup>4</sup>

$$g_{\perp}^* = g_e - \langle f^{(0)} | g_{bulk}(z, \varepsilon_0) | f^{(0)} \rangle. \quad (3.10)$$

Assim, de acordo com o nosso modelo, o fator  $g$  efetivo apresenta uma anisotropia expressa por meio da diferença entre  $g_{QW}^*$  e  $g_{\perp}^*$ , ou seja,

$$\Delta g_{QW} = g_{QW}^* - g_{\perp}^*. \quad (3.11)$$

Conforme exemplificaremos na próxima seção, os dois termos oriundos do acoplamento Rashba apresentam comportamentos distintos, de forma que o efeito de interferência decorrente da superposição desses termos é determinado pela geometria do potencial de confinamento. Em particular, veremos que o acoplamento Rashba apresenta uma contribuição remanescente para heteroestruturas providas de um centro de inversão no espaço, o que permite explicar o efeito de anisotropia observado para algumas dessas estruturas.

<sup>3</sup>Em nosso modelo, a contribuição das bandas remotas  $\delta g_{rem}$  é dada pela diferença entre o valor experimental do fator  $g$  efetivo para o *bulk* e o valor do fator  $g$  efetivo calculado com a fórmula de Roth.

<sup>4</sup>Se considerarmos  $\mathbf{B}$  na direção de crescimento e efetuarmos o mesmo procedimento com o qual obtivemos  $H_{eff;\sigma}^{CB}$  (Eq. 3.4) a partir de  $H_{eff\uparrow\downarrow}^{4\times4}$ , obteremos um hamiltoniano de massa efetiva semelhante à  $H_{eff;\sigma}^{CB}$ , com a diferença de que o termo dependente de spin apresentará apenas a contribuição do *bulk*.

### 3.3 Exemplos

Neste capítulo, vamos considerar poços quânticos semicondutores na aproximação de banda plana (ou seja, vamos desprezar o potencial eletrostático), com o intuito de compreender a influência das interfaces sobre o cálculo de  $g_{QW}^*$ . Inicialmente, vamos explorar estruturas que possuem geometrias distintas e que são artificialmente produzidas através da variação da concentração de alumínio em uma liga semicondutora do tipo  $Al_xGa_{1-x}As$ .

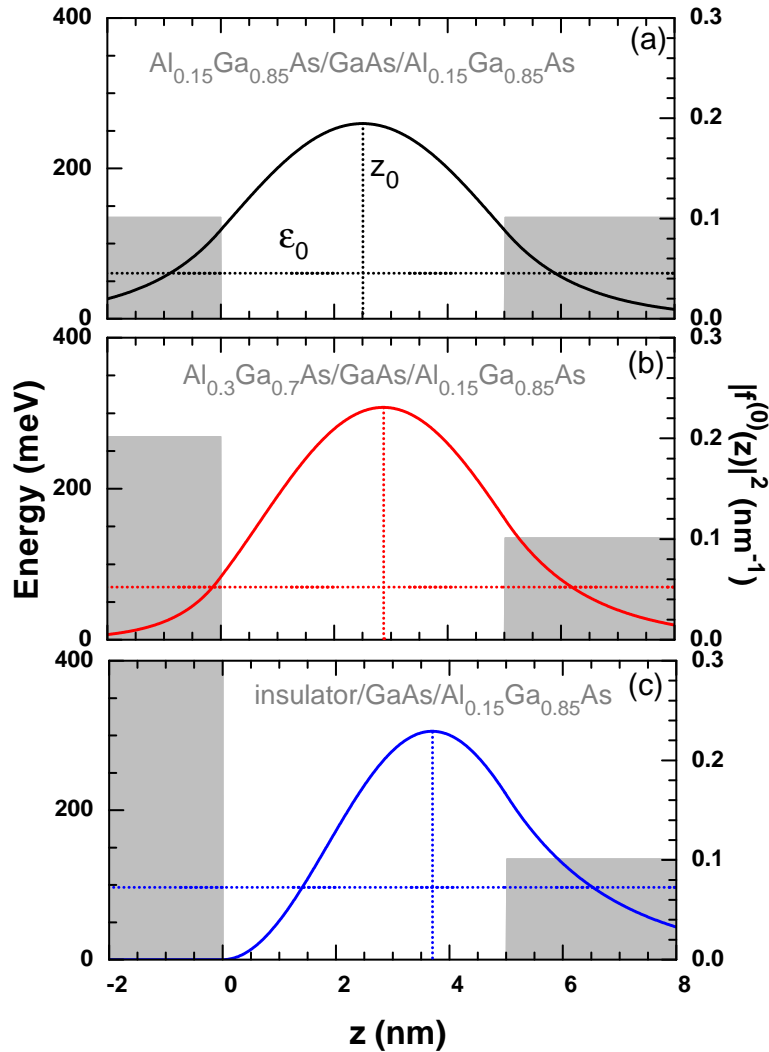


Figura 3.2 - Perfil da banda de condução, autovalor de energia para o estado fundamental, densidade de probabilidade e o centro da órbita ciclotrônica para (a)  $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$ , (b)  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$  e (c)  $insulator/GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$ . De acordo com a concentração  $x$  de alumínio na liga  $Al_xGa_{1-x}As$ , utilizamos os parâmetros  $E_g = (1.519 + 1.247x)eV$  e  $\Delta = (1.859 + 1.115x + 0.37x^2 E_g)eV$ . Para cada interface, o *band-offset* corresponde a 72% do valor resultante da diferença entre os *gaps* dos materiais que a constituem.

A Fig. 3.2 (a) mostra o perfil da banda de condução para um poço quântico simétrico ( $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$ ), onde a posição do centro da órbita, denotada por  $z_0$ , coincide com centro do poço e a função densidade de probabilidade apresenta o mesmo

valor nas interfaces do poço. A Fig. 3.2 (b) mostra a banda de condução para um poço assimétrico ( $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$ ) com uma sensível diferença entre o valor da amplitude de onda nas interfaces e o centro da órbita levemente deslocado em relação ao centro do poço. A Fig. 3.2 (c) mostra o perfil da banda de condução para um poço quântico assimétrico onde uma das barreiras é constituída por um material perfeitamente isolante. Interessante observar que a amplitude de onda vai a zero na interface entre o semiconductor e o isolante, o que ocasiona um maior deslocamento do centro da órbita em relação ao centro do poço, configuração para qual apenas uma interface contribui para o cálculo de  $g_{QW}^*$ . Na aproximação de banda plana ( $v(z) = 0$ ), podemos medir a energia do elétron em relação ao fundo da banda de condução na região do poço, ou seja,  $E_c^w = 0$  e  $E_c^b = v_0$ , enquanto que  $E_v^w = -E_g^w$  e  $E_v^b = -E_g^b + v_0$  definem o perfil da banda de valência. Considerando as interfaces do poço localizadas em  $z_1$  e  $z_2$ , segue a expressão para  $g_{QW}^*$ :

$$g_{QW}^* = g_e - \bar{g}_{bulk} + \frac{4m_e}{\hbar^2} [\delta\eta_1(z_0 - z_1)|f^{(0)}(z_1)|^2 + \delta\eta_2(z_2 - z_0)|f^{(0)}(z_2)|^2], \quad (3.12)$$

onde  $\delta\eta_1 = \eta_w - \eta_l$ ,  $\delta\eta_2 = \eta_w - \eta_r$  (utilizamos  $l$  para identificar a região em que  $z \leq z_1$ ,  $w$  para  $z_1 < z < z_2$  e  $r$  para  $z \geq z_2$ ) e  $\bar{g}_{bulk} = \langle f^{(0)} | g_{bulk}(z, \varepsilon_0) | f^{(0)} \rangle = g_l(\varepsilon_0)P_l + g_w(\varepsilon_0)P_w + g_r(\varepsilon_0)P_r$ . A Fig. 3.3 mostra os resultados obtidos para os casos considerados na Fig. 3.2.

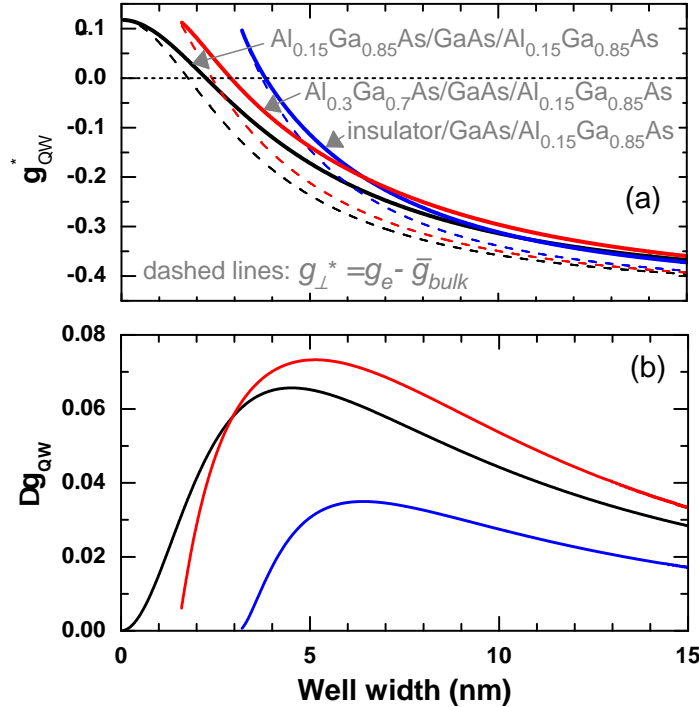


Figura 3.3 - (a) Para as estruturas da Fig. 3.2, temos  $g_{QW}^*$  (em linhas contínuas) e  $g_{\perp}^*$  (em linhas tracejadas) como função da largura do poço. Apresentamos a anisotropia correspondente no painel inferior. No caso da liga  $Al_xGa_{1-x}As$ , calculamos  $\delta g_{rem}$  a partir da expressão empírica para o fator  $g$ ,  $g_{exp}^* = -0.44 + 4.25x - 3.9x^2$ , obtida por Weisbuch e Hermann (WEISBUCH; HERMANN, 1977).

Considerando uma das barreiras como um isolante perfeito, temos que  $f^{(0)}(z_1) = 0$  e, portanto,  $\Delta g_{QW} = \frac{4m_e}{\hbar^2} \delta\eta_2(z_2 - z_0) |f^{(0)}(z_2)|^2$ , ou seja, apenas a interface localizada em  $z_2$  contribui para a anisotropia resultante e  $\Delta g_{QW}$  depende explicitamente da distância entre essa interface e o centro da órbita, isto é,  $z_2 - z_0$ . Por fim, no caso de um poço quântico simétrico, conforme o exemplo mostrado na Fig. 3.2 (a), segue que  $f^{(0)}(z_1) = f^{(0)}(z_2)$  e, como as barreiras são constituídas por um mesmo material, temos que  $\delta\eta_1 = \delta\eta_2$  e  $g_l^*(\varepsilon_0) = g_r^*(\varepsilon_0) = g_b^*(\varepsilon_0) = g_e - g_{bulk=b}(\varepsilon_0)$ . Assim, segue a expressão para a anisotropia:

$$\Delta g_{QW} = \frac{4m_e}{\hbar^2} \delta\eta_1(z_2 - z_1) |f^{(0)}(z_1)|^2. \quad (3.13)$$

Observe que  $\Delta g_{QW}$  é função explícita do comprimento do poço ( $L = z_2 - z_1$ ) e, além disso, as duas interfaces apresentam contribuições aditivas idênticas, um comportamento oposto ao apresentado pelo acoplamento Rashba usual. As curvas presentes na Fig. 3.4 mostram as diferentes aproximações para o cálculo do fator g efetivo, ou seja,  $g_{QW}^*(\varepsilon_0)$ ,  $g_{\perp}^*(\varepsilon_0)$ ,  $g_w^*(\varepsilon_0)$  e  $g_b^*(\varepsilon_0)$ , onde  $\varepsilon_0 = \varepsilon_0(L)$ . Note que, para  $L = 0$ , temos que  $g_{QW}^* = g_{\perp}^* = g_b^*(\varepsilon_0 = v_0) = g_b^*$ , por outro lado, na medida em que  $L$  cresce, os valores de  $g_{QW}^*$  e  $g_{\perp}^*$  aproximam-se do valor  $g_w^* = g_w^*(\varepsilon_0 = 0)$ . O painel menor mostra a comparação entre os resultados provenientes de nosso modelo e a anisotropia observada por experimentos independentes, com (JEUNE et al., 1997) em símbolos abertos e (MALINOWSKI; HARLEY, 2000) em símbolos preenchidos.

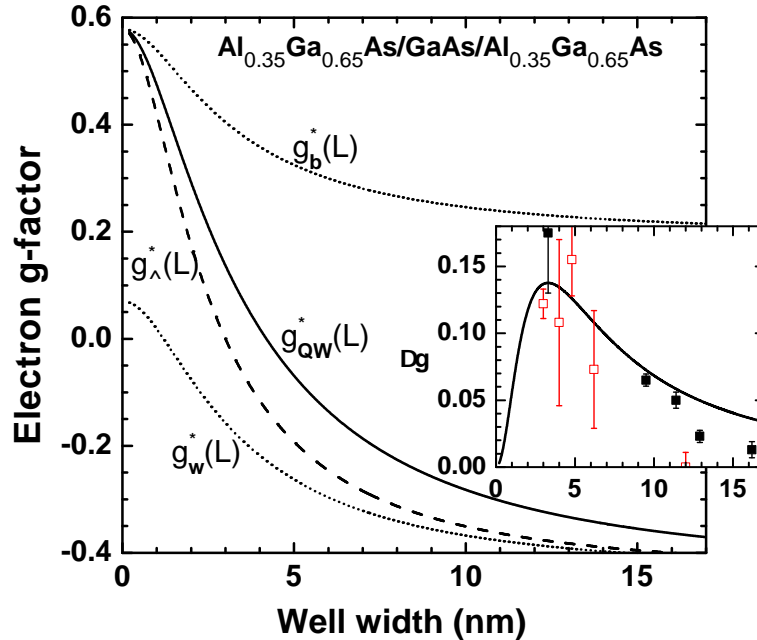


Figura 3.4 - Diferentes aproximações para o fator g efetivo como função da largura do poço, ou seja,  $g_{QW}^*(L)$ ,  $g_{\perp}^*(L)$ ,  $g_w^*(L)$  e  $g_b^*(L)$ . O painel menor compara nosso resultado com a anisotropia observada por experimentos independentes. Os parâmetros utilizados foram:  $m_w^* = 0.067m_e$ ,  $E_g^w = 1.52$  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.

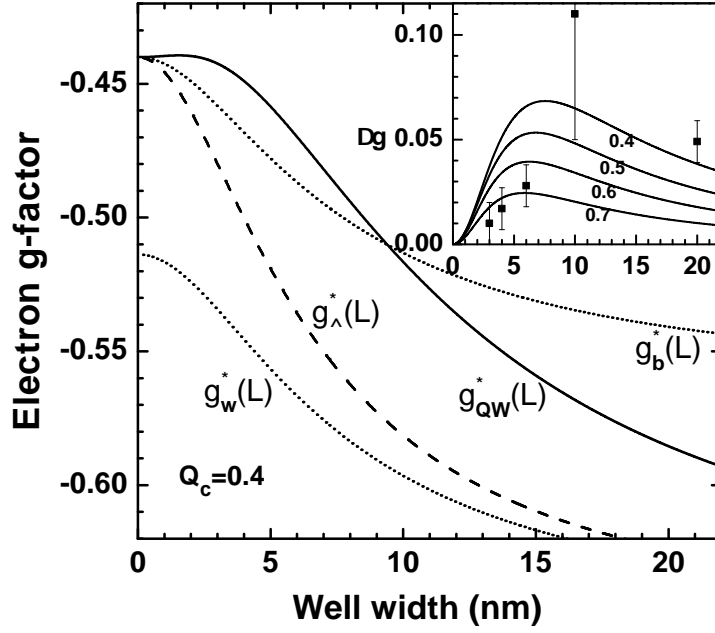


Figura 3.5 - Resultados obtidos para um poço quântico simétrico composto por  $In_{0.11}Ga_{0.89}As$  com barreiras compostas por  $GaAs$ . O painel maior mostra as diferentes aproximações para o fator  $g$  efetivo em função da largura do poço quântico. O painel interno mostra a anisotropia obtida (para diferentes valores de  $Q_c$ ) e os resultados experimentais presentes na Ref. (MALINOWSKI; HARLEY, 2000). Os parâmetros utilizados foram:  $m_w^* = 0.062m_e$ ,  $E_g^w = 1.394$  eV,  $\Delta^w = 0.333$  eV,  $\delta g_{rem}^w = -0.43$  para o poço de  $InGaAs$  e  $E_g^b = 1.53$  eV,  $\Delta^b = 0.34$  eV e  $\delta g_{rem}^b = -0.50$  para a barreira de  $GaAs$ .

A Figura 3.5 mostra os resultados obtidos para um poço composto por  $In_{0.11}Ga_{0.89}As$  com barreiras de  $GaAs$ , ou seja,  $GaAs/In_{0.11}Ga_{0.89}As/GaAs$ . Trata-se de uma estrutura tensionada<sup>5</sup> que apresenta resultados experimentais conhecidos (MALINOWSKI; HARLEY, 2000) e que possui um fértil debate acerca do valor de seu *band-offset* (CHI; HUANG, 1995). Note a influência do termo de interface sobre o comportamento de  $g_{QW}^*$  que, diferentemente de  $g_{\perp}^*$ , apresenta uma suave inflexão em torno de  $L = 3$  e a situação particular em que  $g_{QW}^* \geq g_b^*$  para  $L \leq 9.5$  nm. O painel interno mostra a anisotropia obtida de acordo com a Eq. 3.13 e o pontos experimentais com a barra vertical indicando o erro correspondente; note que, com a incerteza sobre o valor de  $v_0$ , podemos obter a anisotropia para cada valor possível de  $v_0$  (CHI; HUANG, 1995), ou seja, podemos considerar  $Q_c = 0.4, 0.5, 0.6$  e  $0.7$ , onde  $v_0 = Q_c(E_g^b - E_g^w)$ . Outro material que apresenta propriedades particularmente interessantes é o poço quântico composto por heterointerfaces entre a liga binária  $InP$  e a ternária  $InGaAs$ , situação ilustrada na Fig 3.6. A estrutura em questão possui um acoplamento Rashba forte e, com isso, o efeito de anisotropia pode alcançar valores com a diferença de uma ordem de grandeza em relação aos exemplos discutidos até o momento.

<sup>5</sup>A diferença entre os parâmetros de rede associados aos diferentes materiais que constituem uma heterointerface pode resultar em uma tensão permanente sobre o sistema.



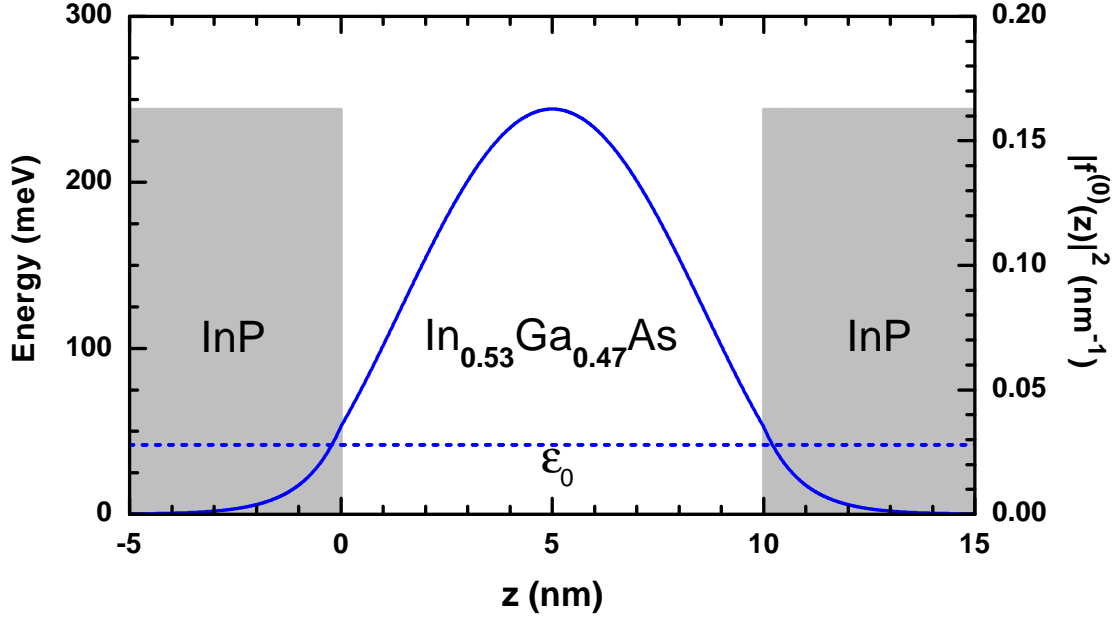


Figura 3.6 - (escala à esquerda) Perfil da banda de condução para o poço quântico  $InP/In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP$  na aproximação de banda plana e o autovalor de energia  $\varepsilon_0$  obtido para o estado fundamental. (escala à direita) Densidade de probabilidade calculada para o estado fundamental. Para a liga ternária  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ , ou seja, para o material que compõem a região do poço, utilizamos os seguintes parâmetros:  $m_w^* = 0.041m_e$ ,  $E_g^w = 0.813$  eV e  $\Delta^w = 0.326$  eV. Para o material da barreira, que é composta por  $InP$ , utilizamos  $E_g^b = 1.424$  eV,  $\Delta^b = 0.108$  eV e  $v_0 = 0.244$  eV.

A Fig. 3.6 mostra o potencial da banda de condução com o autovalor de energia  $\varepsilon_0$  e a densidade de probabilidade para o estado fundamental, obtidos como solução da Eq. 3.7, ou seja,

$$f^{(0)}(z) = \begin{cases} A_b e^{-k_b|z|} & , |z| \geq L/2 \\ A_w \cos k_w z & , |z| \leq L/2 \end{cases} \quad (3.14)$$

onde  $k_w = \sqrt{2m_w\varepsilon_0/\hbar^2}$  e  $k_b = \sqrt{2m_b(v_0 - \varepsilon_0)/\hbar^2}$ ;  $A_b$  e  $A_w$  são constantes determinadas pela condição de normalização. O autovalor de energia  $\varepsilon_0$  determina a solução da seguinte equação transcendental:

$$\tan(k_w L/2) = \sqrt{\frac{m_w}{m_b} \left( \frac{2m_w v_0}{\hbar^2 k_w^2} - 1 \right)}. \quad (3.15)$$

Então, para cada valor de  $L$ , obtemos  $\varepsilon_0(L)$ ,  $f^{(0)}(z)$ ,  $g_{QW}^*(L)$ ,  $g_{\perp}^*(L)$ ,  $g_w^*(\varepsilon_0)$  e  $g_b^*(\varepsilon_0)$ . A Fig. 3.7 mostra os resultados obtidos considerando a heteroestrutura da Fig 3.6, e, conforme o esperado, o acoplamento Rashba apresenta uma contribuição ainda mais significativa neste caso, com a anisotropia apresentando um ponto de máximo em  $L \sim 5$  nm, onde atinge um valor em de torno de 1.5, ou seja, um valor muito superior para a anisotropia, se comparamos com as heteroestruturas que foram consideradas nos exemplos anteriores.

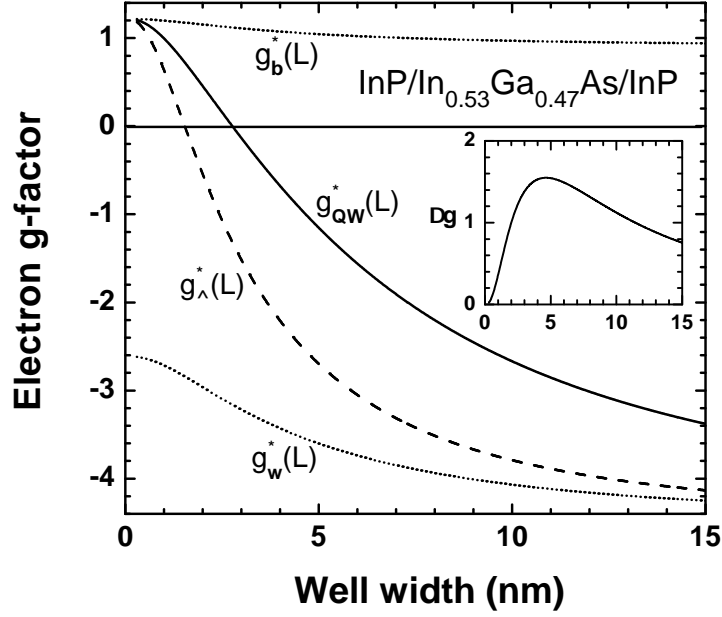


Figura 3.7 - Resultados obtidos para a estrutura mostrada na Fig. 3.6. O painel maior mostra o fator  $g$  de spin efetivo como função da largura do poço, e o painel interno mostra a anisotropia correspondente. As correções das bandas remotas  $\delta g_{rem}^w = -1.36$  e  $g_{rem}^b = 0.24$  foram obtidas a partir de valores experimentais conhecidos do fator  $g$  efetivo para o  $InP$  e o  $In_{0.53}Ga_{0.47}As$  (KOSAKA et al., 2001).

Por fim, vamos discutir o limite de campo magnético nulo, onde o sistema restaura a simetria da translação no plano  $x-y$  e, conforme a suposição inicial,  $k_x$  assume a condição de número quântico referente ao módulo do vetor de onda no plano (ou seja,  $k_{||}$ ) e o termo dependente de spin do Hamiltoniano 3.4 ficará reduzido ao acoplamento Rashba, assim como nas Referências (GERCHIKOV; SUBASHIEV, 1992; SILVA et al., 1994; SILVA et al., 1997):

$$H_R = -\sigma\alpha_R(z, \varepsilon_\sigma)k_{||}. \quad (3.16)$$

O próximo capítulo será exclusivamente dedicado ao estudo do efeito Rashba, momentaneamente vamos apenas discutir o comportamento de  $H_R$ , de acordo com a simetria apresentada pelo sistema, esclarecendo a diferença entre os resultados obtidos para estruturas que possuem e as que não possuem centro de inversão no espaço. Como exemplo, considere o potencial da banda de condução como mostrado na Fig. 3.2 (b), onde temos um acoplamento Rashba sensível apenas nas interfaces  $z_1 = 0$  e  $z_2 = L$ , ou seja,

$$\alpha_R(z, \varepsilon_\sigma) = [\eta_w(\varepsilon_\sigma) - \eta_l(\varepsilon_\sigma)] \delta(z) - [\eta_w(\varepsilon_\sigma) - \eta_r(\varepsilon_\sigma)] \delta(z - L). \quad (3.17)$$

Então, se conhecemos a solução da Eq. 3.7 para o estado fundamental (isto é, a autofunção  $f^{(0)}(z)$  e o autovalor  $\varepsilon_0$ ), podemos obter o *splitting* decorrente do acoplamento Rashba, utilizando teoria de perturbação de primeira ordem e calculando o valor esperado de  $H_R$ .

Com efeito,

$$\langle f^{(0)} | H_R | f^{(0)} \rangle = \sigma (\delta\eta_1 |f^{(0)}(0)|^2 - \delta\eta_2 |f^{(0)}(L)|^2) k_{\parallel}. \quad (3.18)$$

Assim, no limite de campo magnético nulo, quando consideramos uma heteroestrutura na aproximação de banda plana, o *splitting* Rashba dependerá explicitamente do valor da amplitude de onda nas interfaces (isto é,  $f^{(0)}(0)$  e  $f^{(0)}(L)$ ) e da diferença entre os parâmetros de acoplamento SO para os diferentes materiais (ou seja,  $\delta\eta_1$  e  $\delta\eta_2$ ). A Fig. 3.2 (c) representa o caso mais simples, onde resta apenas o efeito de uma das interfaces,

$$\langle f^{(0)} | H_R | f^{(0)} \rangle = -\sigma\delta\eta_2 |f^{(0)}(L)|^2 k_{\parallel}. \quad (3.19)$$

Ainda na aproximação de banda plana, considere o caso de um poço quântico simétrico de largura  $L$ , conforme mostrado na Fig. 3.6. Novamente, o parâmetro de acoplamento Rashba apresenta contribuições apenas nas interfaces e, além disso, neste caso, as barreiras apresentam composições idênticas, ou seja,  $\eta_l = \eta_r = \eta_w$ . Com isso,

$$\alpha_R(z, \varepsilon_\sigma) = [\eta_w(\varepsilon_\sigma) - \eta_b(\varepsilon_\sigma)] [\delta(z) - \delta(z - L)]. \quad (3.20)$$

Observe que, para um poço quântico simétrico, o valor da função de onda nas interfaces deve ser o mesmo, isto é,  $f^{(0)}(0) = f^{(0)}(L)$ , de forma que o acoplamento Rashba não perturba o valor esperado da energia, pois o valor esperado do termo de Rashba, quando calculado na base  $\{|f^{(0)}\rangle\}$ , é nulo, ou seja,

$$\langle f^{(0)} | H_R | f^{(0)} \rangle = \sigma\delta\eta (|f^{(0)}(L)|^2 - |f^{(0)}(0)|^2) k_{\parallel} = 0. \quad (3.21)$$

Tal resultado é particularmente esclarecedor, pois evidencia a diferença de comportamento entre os termos oriundos do acoplamento Rashba (termos que possuem o mesmo parâmetro de acoplamento  $\alpha_R(z, \varepsilon)$ ). No caso de um poço quântico simétrico, as interfaces apresentam contribuições de mesma magnitude, que se cancelam para o acoplamento Rashba usual; entretanto, quando consideramos a influência de um campo magnético externo paralelo à interface do poço, um segundo termo, também derivado do acoplamento Rashba, apresenta contribuições aditivas idênticas para as (duas) interfaces, tendo como resultado uma anisotropia giromagnética finita mesmo para estruturas providas de um centro de inversão no espaço. No próximo capítulo, vamos explorar o efeito Rashba, considerando o limite de campo magnético nulo para o modelo que foi previamente desenvolvido. Iremos, contudo, além da aproximação de banda plana; trataremos de heterojunções semicondutoras sob a influência do campo elétrico decorrente do confinamento dos portadores, considerando a dependência do termo de Rashba com a densidade de carga presente na heterojunção, questão que é de particular interesse para a proposta de Datta e Das ([DATTa; DAS, 1990](#)).



## 4 EFEITO RASHBA

Na ausência de um campo magnético externo, os autoestados permitidos para elétrons confinados em heteroestruturas semicondutoras podem ter a degenerescência de spin levantada pela interação spin-órbita, cujo efeito, no caso do acoplamento Rashba, está associado a um potencial de confinamento desprovido de um centro de inversão no espaço. Entre as chamadas heteroestruturas semicondutoras, as heterojunções correspondem ao caso mais simples, constituídas por uma única interface. Nos últimas décadas, com o advento da spintrônica, o estudo das heterojunções semicondutoras ganhou uma motivação adicional. Em especial, conforme discutimos na introdução desta tese, a proposta de Datta e Das para o transistor de spin explora a possibilidade de manejo do spin de elétrons confinados em heterojunções semicondutoras, a partir de modulação da intensidade de acoplamento Rashba com a densidade eletrônica superficial. Neste capítulo, veremos que, considerando estados eletrônicos no limite de baixas energias, podemos desenvolver um modelo adequado ao estudo do efeito Rashba em heterojunções, assim como investigar suas possíveis influências. A Fig. 4.1 ilustra a diagramação das bandas de valência e condução de uma heterojunção semicondutora para estados confinados próximos à interface (em  $z = 0$ ), ou seja, para estados confinados em uma região onde o potencial é linear em  $z$ .

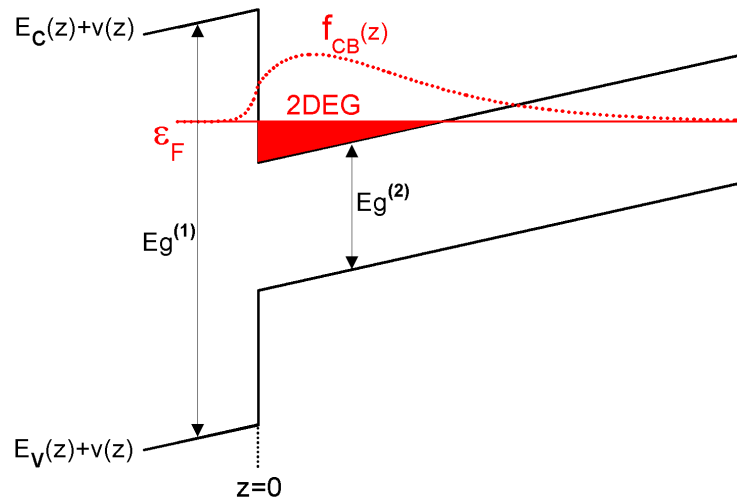


Figura 4.1 - Diagrama de bandas para uma heterojunção semicondutora III-V. Mostra o perfil das bandas de condução e valência para estados confinados próximos à interface. Mostra também a componente da função envelope para a banda de condução e o preenchimento dos níveis de energia até a chamada energia de Fermi. O alto grau de assimetria do perfil da banda de condução permite o confinamento dos elétrons, através de um poço quântico triangular, o que dá origem a um acoplamento Rashba forte cuja intensidade varia com a densidade de eletrônica superficial do gás.

#### 4.1 Massa efetiva no limite de baixas energias

Modelos derivados da aproximação de massa efetiva envolvendo muitas bandas e que utilizam soluções em série de potências, considerando poços quânticos semicondutores e estados eletrônicos no limite de baixas energias, são bem conhecidos na literatura (LAS-SNIG, 1985; SILVA, 1992; SILVA et al., 1994). De forma geral, em um modelo com muitas bandas, a massa depende da coordenada da posição e também da energia  $e$ , portanto, a correspondente equação de massa efetiva não pode, nesse caso, ser solucionada analiticamente. No caso de heterojunções e estados eletrônicos cujas energias se aproximam, na região do poço, do fundo da banda de condução (ou seja, para pequenos valores de  $\varepsilon_F$ , conforme mostrado na Fig. 4.1), podemos obter uma solução analítica, elegante e particularmente transparente para o hamiltoniano de massa efetiva dado pela Eq. 3.4, no limite de campo magnético nulo, ou seja, considerando de forma usual o acoplamento Rashba.

Conforme pode ser visto na Fig. 4.1, o gás de elétrons está confinado em um poço de potencial triangular com uma densidade eletrônica superficial homogênea sobre o plano paralelo à interface. Com isso, associamos um potencial eletrostático no regime linear em  $z$ , isto é,  $v(z) = e\mathcal{E}z$ . O perfil triangular é obtido pela superposição de  $v(z)$  com a descontinuidade da banda de condução em  $z = 0$ . O campo elétrico será dado por  $\mathcal{E} = en_s/\varepsilon_{sc}$ , onde  $n_s$  é a densidade de elétrons e  $\varepsilon_{sc}$  é a constante dielétrica do meio. Utilizando o limite de baixas energias, para a região em que  $z \leq 0$ , vamos renormalizar os valores dos parâmetros que compõem a equação de massa efetiva levando em conta o efeito do *band-offset* (BROZAK et al., 1990); para  $z \geq 0$ , a energia de Fermi deverá estar suficientemente próxima ao fundo da banda, de forma que a convergência da expansão fique garantida (SILVA et al., 1994). Considerando expansões em séries de Taylor para  $1/m(z, \varepsilon_\sigma)$  e  $\eta(z, \varepsilon_\sigma)$  (Eqs. 3.5 e 3.6) e substituindo os respectivos resultados no hamiltoniano de massa efetiva (Eq. 3.4) tomado no limite em que o campo magnético é nulo ( $B = 0$ ), onde o termo dependente de spin fica reduzido ao acoplamento Rashba (ou seja,  $\varepsilon_\sigma = \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R$ ):

$$H_R \left( z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R; k_{\parallel}, -i \frac{d}{dz} \right) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R)} \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R)} + E_c(z) + v(z) \mp k_{\parallel} \frac{d}{dz} \eta(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R), \quad (4.1)$$

cujos auto-estados, denotados por  $f^{\uparrow\downarrow}$ , satisfazem as seguintes condições de contorno:

$$f_{z \leq 0}^{\uparrow\downarrow}(z=0) = f_{z \geq 0}^{\uparrow\downarrow}(z=0) \quad (4.2)$$

$$\left( \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R)} \pm k_{\parallel} \eta(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R) \right) f_{z \leq 0}^{\uparrow\downarrow}(z) \Big|_{z=0} = \left( \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R)} \pm k_{\parallel} \eta(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R) \right) f_{z \geq 0}^{\uparrow\downarrow}(z) \Big|_{z=0}. \quad (4.3)$$

As expansões de  $1/m(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R)$  e  $\eta(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R)$  no limite de baixas energias, ou seja,

$$\frac{1}{m(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R)} = \sum_n \mathcal{A}_n \delta^n \quad \text{e} \quad \eta(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R) = \sum_n \mathcal{B}_n \delta^n, \quad (4.4)$$

podem ser obtidas segundo a fórmula de Taylor para a expansão de uma função arbitrária (que será denotada por  $\mathcal{F}$ ), em torno de um parâmetro pequeno (denotado por  $\delta$ ):

$$\mathcal{F}(\delta) = \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{1}{n!} \frac{d^n \mathcal{F}}{d\delta^n} \right)_{\delta=0} \delta^n. \quad (4.5)$$

Interessante observar que o valor de  $\delta$  depende do valor da energia e também do valor da posição, então, na medida em que variam os valores da energia e da posição, quanto menor for o valor numérico de  $\delta$ , mais precisos serão os resultados previstos pelo nosso modelo<sup>1</sup>. Para um sistema em comum acordo com as aproximações descritas até aqui, mostra-se que

$$\delta = \frac{\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R - v(z) - E_c(z)}{E_g(z) + \Delta(z)} \quad (4.6)$$

é um parâmetro que permite controlar a precisão do modelo e obter resultados com uma boa margem de segurança (SILVA et al., 1997). Lembrando que  $v(z) = e\mathcal{E}z$ ,  $E_c(z) = v_0\theta(-z)$ ,  $E_g(z) = E_g^{(1)}\Theta(-z) + E_g^{(2)}\Theta(z)$  e  $\Delta(z) = \Delta^{(1)}\Theta(-z) + \Delta^{(2)}\Theta(z)$ , utilizando expansões em primeira ordem, ou seja,

$$\frac{1}{m(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R)} = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}_1 \delta \quad \text{e} \quad \eta(z, \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R) = \mathcal{B}_0 + \mathcal{B}_1 \delta, \quad (4.7)$$

já obtemos correções de não-parabolicidade e de interação spin-órbita no hamiltoniano efetivo para estados de condução. Com efeito

$$H_R = \frac{\hbar^2}{2} \mathcal{A}_0 \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right) + \frac{\hbar^2}{2} \mathcal{A}_1 \left( -\frac{d}{dz} \delta \frac{d}{dz} + \delta k_{\parallel}^2 \right) + E_c(z) + v(z) \mp k_{\parallel} \frac{d}{dz} (\mathcal{B}_0 + \mathcal{B}_1 \delta). \quad (4.8)$$

Os coeficientes da expansão de Taylor, calculados de acordo com a Eq. 4.5, estão presentes na Tab. 4.1. A equação acima (Eq. 4.8) representa um resultado típico da aproximação de massa efetiva; verifica-se imediatamente que o coeficiente  $\mathcal{A}_0$  está relacionado com a massa efetiva da seguinte forma<sup>2</sup>

$$\mathcal{A}_0 = \frac{1}{\bar{m}_1} \Theta(-z) + \frac{1}{m_2^*} \Theta(z). \quad (4.9)$$

<sup>1</sup>Para pequenos valores de  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R$  (baixas energias) e de  $z$  (estados confinados próximos à interface).

<sup>2</sup>Obtemos, da Tab. 4.1,  $\bar{m}_1 = \frac{\hbar^2 (E_g^{(1)} - v_0)(E_g^{(1)} - v_0 + \Delta^{(1)})}{P^2 3(E_g^{(1)} - v_0) + 2\Delta^{(1)}}$  e  $m_2^* = \frac{\hbar^2 E_g^{(2)}(E_g^{(2)} + \Delta^{(2)})}{P^2 3E_g^{(2)} + 2\Delta^{(2)}}$ .

Também é interessante notar que, em ordem zero, a interação SO se manifesta nas condições de contorno<sup>3</sup> de acordo com expressões presentes na Tab. 4.1, ou seja<sup>4</sup>,

$$\mathcal{B}_0 = \bar{\eta}_1 \Theta(-z) + \eta_2^* \Theta(z). \quad (4.10)$$

Em primeira ordem obtemos as correções de não-parabolicidade (o coeficiente  $\mathcal{A}_1$  permite definir a constante de não-parabolicidade:  $a = -m_2^* \mathcal{A}_1$ ) e do acoplamento spin-órbita.

Tabela 4.1 - Coeficientes da expansão em série de Taylor.

	$z \leq 0$	$z \geq 0$
$\mathcal{A}_0$	$\frac{P^2}{\hbar^2} \left( \frac{2}{E_g^{(1)} - v_0} + \frac{1}{E_g^{(1)} - v_0 + \Delta^{(1)}} \right)$	$\frac{P^2}{\hbar^2} \left( \frac{2}{E_g^{(2)}} + \frac{1}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}} \right)$
$\mathcal{B}_0$	$\frac{P^2}{2} \left( \frac{1}{E_g^{(1)} - v_0} - \frac{1}{E_g^{(1)} - v_0 + \Delta^{(1)}} \right)$	$\frac{P^2}{2} \left( \frac{1}{E_g^{(2)}} - \frac{1}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}} \right)$
$\mathcal{A}_1$	...	$-\frac{P^2}{\hbar^2} \left( \frac{E_g^{(2)2} + 2(E_g^{(2)} + \Delta^{(2)})^2}{E_g^{(2)2} (E_g^{(2)} + \Delta^{(2)})} \right)$
$\mathcal{B}_1$	$\frac{P^2}{2} \left( \frac{E_g^{(1)} + \Delta^{(1)}}{(E_g^{(1)} - v_0 + \Delta^{(1)})^2} - \frac{E_g^{(1)} + \Delta^{(1)}}{(E_g^{(1)} - v_0)^2} \right)$	$\frac{P^2}{2} \left( \frac{1}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}} - \frac{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}}{E_g^{(2)2}} \right)$

Veremos que, além de considerar o sistema no limite de baixas energias, pode ser muito útil também considerar o poço quântico na aproximação de barreira infinita. Os efeitos da não-parabolicidade e da interação SO foram estudados, de acordo com a Eq. 4.8, para o caso em que a região de barreira corresponde a um material perfeitamente isolante, ou seja, um poço quântico triangular na aproximação de barreira infinita (SILVA et al., 1994). Em tal aproximação perde-se a dependência dos resultados com os parâmetros do material que compõem a barreira; é nula a probabilidade de que os elétrons sejam encontrados na região da barreira, conforme pode ser observado na Fig. 4.2.

<sup>3</sup>Substituindo as Eqs. 4.9 e 4.10 na Eq. 4.3, verifica-se a Eq. 4.16.

<sup>4</sup>Da Tab. 4.1:  $\bar{\eta}_1 = \frac{\hbar^2}{2m_1^*} \frac{\Delta^{(1)}}{3E_g^{(1)} + 2\Delta^{(1)}} \frac{E_g^{(1)}(E_g^{(1)} + \Delta^{(1)})}{(E_g^{(1)} - v_0)(E_g^{(1)} - v_0 + \Delta^{(1)})}$  e  $\eta_2^* = \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{\Delta^{(2)}}{3E_g^{(2)} + 2\Delta^{(2)}}$ .



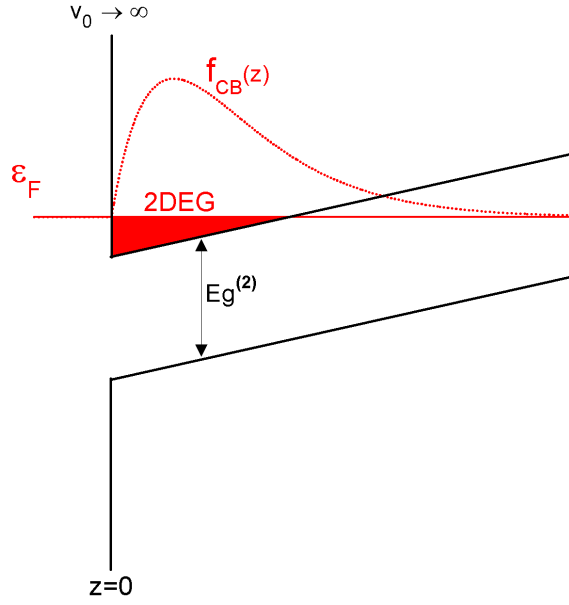


Figura 4.2 - Diagrama de bandas para uma heterojunção semicondutora na aproximação de barreira infinita (ou barreira perfeitamente isolante). Mostra o perfil das bandas de condução e valência em uma região próxima à interface entre os materiais. Mostra também a componente da função envelope para a banda de condução e a energia de Fermi. Observe que a função envelope evanesce anulando-se na interface, portanto, a probabilidade de encontrar o elétron não estende-se sobre região de barreira.

Nesse caso, o sistema fica completamente determinado pelos parâmetros do material 2, ou seja,  $E_g = E_g^{(2)}$  e  $\Delta = \Delta^{(2)}$ . Obtemos a correção de não-parabolicidade de forma auto-consistente, substituímos  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R$  por  $\varepsilon_0$  na expressão de  $\delta$  (Eq. 4.6), onde  $\varepsilon_0$  está de acordo com a aproximação de massa efetiva em ordem zero<sup>5</sup>. Com efeito

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2} \mathcal{A}_1 \left( -\frac{d}{dz} \delta \frac{d}{dz} + \delta k_{\parallel}^2 \right) &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{a}{m_2^*} \left[ -\frac{d}{dz} \frac{\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right)}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}} \frac{d}{dz} + \frac{\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right)}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}} k_{\parallel}^2 \right] \\ &= -a \frac{\left[ \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right) \right]^2}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Pela Eq. 4.8, no limite de baixas energias, vemos que a correção de primeira ordem resulta em um termo linear em  $k_{\parallel}$  no hamiltoniano efetivo para a estados de condução; é o conhecido termo de Rashba (BYCHKOV; RASHBA, 1984). Decorre, portanto, a seguinte expressão para o coeficiente Rashba:

$$\alpha_2^* = \mathcal{B}_1 \frac{d}{dz} \delta = \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{\Delta^{(2)}}{E_g^{(2)}} \frac{2E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}}{(E_g^{(2)} + \Delta)(3E_g^{(2)} + 2\Delta^{(2)})} e\mathcal{E}. \quad (4.12)$$

<sup>5</sup>Teremos, em ordem zero,  $\varepsilon_0(k_{\parallel}, -id/dz) = \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right) + e\mathcal{E}z$ .

Não há, obviamente, confusão possível:  $\mathcal{B}_1$  é um dos coeficientes da expansão de Taylor em primeira ordem, para  $z \geq 0$ , conforme mostrado na Tab. 4.1. Observe que, embora a Eq. 4.12 para o coeficiente Rashba leve em conta aproximações que tornam limitada a sua utilização, tal expressão tem como vantagem permitir o estudo do efeito Rashba em um poço quântico semiconductor, conhecendo apenas os parâmetros do material do poço e a densidade eletrônica superficial do gás (SILVA et al., 1994). Contudo, sabemos que o efeito de penetração da função de onda na região de barreira possui uma influência significativa sobre o coeficiente Rashba (GRUNDLER, 2000). Nessa região, utilizamos a expansão em série de potências dada pela Eq. 4.5, considerando possíveis valores da energia em um regime tal que  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R \ll E_g^{(1)} + \Delta^{(1)}$ . Entretanto, se o valor de  $v_0$  é comparável ao valor de  $E_g^{(1)} + \Delta^{(1)}$ , então os parâmetros da região de barreira terão seus valores renormalizados pelo *band-offset* (BROZAK et al., 1990). Definindo  $v_0 = E_c^{(1)} - E_c^{(2)}$ , a expansão em primeira ordem fornece o parâmetro de acoplamento SO

$$\bar{\alpha}_1 = \alpha_1^* \frac{1 - v_0/(E_g^{(1)} + \Delta^{(1)}/2)}{(1 - v_0/E_g^{(1)})^2 [1 - v_0/(E_g^{(1)} + \Delta^{(1)})]^2}. \quad (4.13)$$

Observe que, para  $v_0 = 0$ , recuperamos os valores dos parâmetros tomados para o fundo da banda de condução; nesse caso teremos:  $\bar{\alpha}_1 = \alpha_1^*$ ,  $\bar{\eta}_1 = \eta_1^*$  e  $\bar{m}_1 = m_1^*$ . Reunindo os resultados da expansão (a não-parabolicidade na região de barreira foi desprezada por ser a correção menos significativa) e indexando os parâmetros de acordo com a região (material 1 se  $z \leq 0$  e material 2 se  $z \geq 0$ ), obtemos o seguinte hamiltoniano efetivo para estados de condução em uma heterojunção

$$H_R = \left\{ \begin{array}{l} \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{\bar{m}_1} \Theta(-z) + \frac{1}{m_2^*} \Theta(z) \right) \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right) + e\mathcal{E}z + v_0 \Theta(-z) \quad , \quad n = 0 \\ -a \frac{\left[ \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right) \right]^2}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}} \Theta(z) \mp (\bar{\alpha}_1 \Theta(-z) + \alpha_2^* \Theta(z)) k_{\parallel} \quad , \quad n = 1 \end{array} \right\}. \quad (4.14)$$

Observe que o hamiltoniano é matematicamente representado por uma série de Taylor; a não-parabolicidade e a interação SO são os termos de primeira de ordem; conquanto que em ordem zero, o hamiltoniano acima não seja exatamente parabólico<sup>6</sup>. Por fim, das Eqs. 4.2 e 4.3, obtemos as seguintes condições de contorno:

$$f_1^{\uparrow\downarrow}(z=0) = f_2^{\uparrow\downarrow}(z=0) \quad (4.15)$$

$$\left( \frac{\hbar^2}{2\bar{m}_1} \frac{d}{dz} f_1^{\uparrow\downarrow}(z) \pm \bar{\eta}_1 k_{\parallel} f_1^{\uparrow\downarrow}(z) \right)_{z=0} = \left( \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{d}{dz} f_2^{\uparrow\downarrow}(z) \pm \eta_2^* k_{\parallel} f_2^{\uparrow\downarrow}(z) \right)_{z=0}. \quad (4.16)$$

<sup>6</sup>Pois a renormalização da massa já leva em conta o efeito de não-parabolicidade (BROZAK et al., 1990).

## 4.2 Solução variacional dependente de spin

A função variacional de Fang-Howard (FANG; HOWARD, 1966) tem ampla utilização no contexto dos sistemas de baixa dimensionalidade (ANDO et al., 1982) e, em particular, das heterojunções semicondutoras (DAVIES, 1998). A função de Fang-Howard modificada oferece um arcabouço teórico mais realístico do que o de sua predecessora, atribuindo um valor finito para a função envelope na interface entre os diferentes materiais (BASTARD, 1988). Nossa modelagem da amplitude de onda na interface, através da solução variacional dependente de spin (SANDOVAL et al., 2009; SANDOVAL et al., 2011), ainda permite levar em conta o efeito da interação spin-órbita; ou seja, permite atribuir para cada autoestado de spin ( $\uparrow$  ou  $\downarrow$ ), um valor para a amplitude de onda na interface. Inicialmente, utilizaremos tal solução variacional para o estudo do efeito Rashba, onde o desdobramento de energia no nível de Fermi é altamente influenciado pelo grau de assimetria do perfil de condução. Veremos que este formalismo permite identificar diferentes contribuições ao desdobramento Rashba e que, no limite de barreira infinita, recuperamos a solução variacional de Fang-Howard e o parâmetro efetivo para o acoplamento SO obtido por de Andrada e Silva et al. (SILVA et al., 1994). Seja<sup>7</sup>, para tanto,

$$\langle z | f_{\uparrow\downarrow}^b \rangle = \begin{cases} \langle z | f_1^{\uparrow\downarrow} \rangle = A_{\uparrow\downarrow} e^{k_0 z/2} & , \quad z \leq 0, \\ \langle z | f_2^{\uparrow\downarrow} \rangle = B_{\uparrow\downarrow} (z + c_{\uparrow\downarrow}) e^{-bz/2} & , \quad z \geq 0, \end{cases} \quad (4.17)$$

onde  $k_0 = 2\sqrt{2\bar{m}_1 v_0/\hbar^2}$  e  $b$  é o parâmetro variacional (BASTARD, 1988). As equações 4.15 e 4.16 impõem respectivamente

$$A_{\uparrow\downarrow} = B_{\uparrow\downarrow} c_{\uparrow\downarrow}, \quad (4.18)$$

$$c_{\uparrow\downarrow} = \frac{2}{b + \frac{m_2^*}{m_1} k_0 \pm 4 \frac{m_2^*}{\hbar^2} (\bar{\eta}_1 - \eta_2^*) k_{\parallel}} \quad (4.19)$$

e, da condição de normalização<sup>8</sup>, temos ainda

$$B_{\uparrow\downarrow} = \sqrt{\frac{b^3/2}{1 + bc_{\uparrow\downarrow} + b^2 c_{\uparrow\downarrow}^2 (1 + b/k_0)/2}}. \quad (4.20)$$

A equação 4.19 mostra explicitamente que a imposição estrita das condições de contorno (Eqs. 4.15 e 4.16) é responsável pelo acoplamento entre o vetor de onda no plano e o grau de liberdade de spin na solução variacional para a função envelope da banda de condução. A Fig. 4.3 mostra, como resultado, o caso de uma heterinterface do tipo *CdTe/InSb*.

<sup>7</sup>Denotando  $f_{\uparrow\downarrow}^b(z) = \langle z | f_{\uparrow\downarrow}^b \rangle$  e, para seu complexo conjugado,  $f_{\uparrow\downarrow}^{b*}(z) = \langle f_{\uparrow\downarrow}^b | z \rangle$ ; observe que, no caso em questão, temos  $f_{\uparrow\downarrow}^b(z) = f_{\uparrow\downarrow}^{b*}(z)$ ,  $f_1^{\uparrow\downarrow}(z) = f_1^{\uparrow\downarrow*}(z)$  e  $f_2^{\uparrow\downarrow}(z) = f_2^{\uparrow\downarrow*}(z)$ .

<sup>8</sup>Os autoestados  $|f_{\uparrow\downarrow}^b\rangle$  devem ser normalizados, ou seja,  $\langle f_{\uparrow\downarrow}^b | f_{\uparrow\downarrow}^b \rangle = 1$ ; lembrando que  $\langle f_{\uparrow\downarrow}^b | f_{\uparrow\downarrow}^b \rangle = \langle f_1^{\uparrow\downarrow} | f_1^{\uparrow\downarrow} \rangle + \langle f_2^{\uparrow\downarrow} | f_2^{\uparrow\downarrow} \rangle = \int_{-\infty}^0 |f_1^{\uparrow\downarrow}(z)|^2 dz + \int_0^{\infty} |f_2^{\uparrow\downarrow}(z)|^2 dz$ .

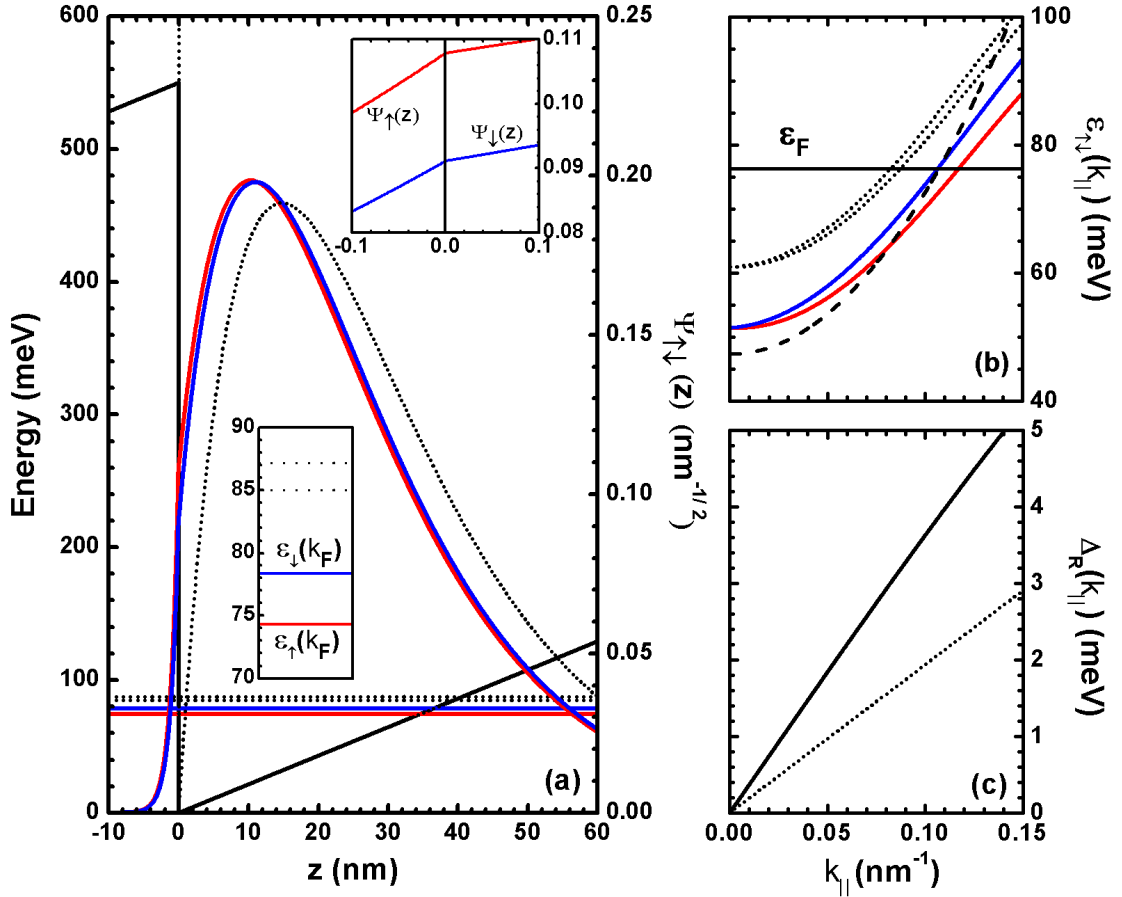


Figura 4.3 - (a) (escala à esquerda) Mostra o perfil de condução para uma heterojunção semicondutora do tipo  $CdTe/InSb$ , com uma densidade eletrônica superficial de  $2 \times 10^{11} cm^{-2}$  e, mostra também, o desdobramento Rashba no nível de Fermi. O *inset* inferior mostra o acréscimo desse *splitting*, provocado pela penetração da função de onda na região de barreira. (escala à direita) Mostra a solução variacional dependente de spin; o comportamento da amplitude de onda na região de interface, para ambos estados ( $\uparrow$  e  $\downarrow$ ), está mostrado em detalhes no *inset* superior. (b) Mostra a relação de dispersão para cada auto-estado de spin e (c) o desdobramento da energia, provocado pelo acoplamento Rashba, em função do módulo do vetor de onda no plano. As linhas pontilhadas mostram a aproximação de barreira perfeitamente isolante e a tracejada a aproximação parabólica.

### 4.3 Efeito Rashba variacional

Calculamos os seguintes valores esperados

$$\varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k_{\parallel}, b) = \langle f_{\uparrow\downarrow}^b | H_R | f_{\uparrow\downarrow}^b \rangle = \langle H_R \rangle_{\uparrow\downarrow}^b \quad (4.21)$$

e, para cada valor da densidade eletrônica, determinamos o valor de  $b$  de forma que a energia total do sistema seja mínima<sup>9</sup>, ou seja,  $\left[ \frac{d}{db} \varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k_{\parallel}, b) \right]_{b=b_{min}} = 0$ ; os autovalores de energia ficam, portanto, definidos<sup>10</sup>:  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k_{\parallel}) = \varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k_{\parallel}, b = b_{min}) = \langle H_R \rangle_{\uparrow\downarrow}^{b=b_{min}} \equiv \langle H_R \rangle_{\uparrow\downarrow}$ .

<sup>9</sup>Levando em conta a aproximação de Hartree para a interação elétron-elétron (DAVIES, 1998).

<sup>10</sup>Assim como o desdobramento da energia:  $\Delta_R(k_{\parallel}) = |\varepsilon_{\uparrow}(k_{\parallel}) - \varepsilon_{\downarrow}(k_{\parallel})|$ .

Por conveniência, podemos denotar o Hamiltoniano 4.14 com uma soma de seus termos,

$$H_R = \sum_i H_R^{(i)}. \quad (4.22)$$

Utilizando os autoestados  $|f_{\uparrow\downarrow}\rangle$  ( $= |f_{\uparrow\downarrow}^{b=b_{min}}\rangle$ ) para calcular os valores esperados de  $H_R^{(i)}$  (dado pelo  $i$ -ésimo termo do Hamiltoniano 4.14), isto é, calculando  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^{(i)} = \langle H_R^{(i)} \rangle_{\uparrow\downarrow}$ , obtemos<sup>11</sup>

$$\varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k_{\parallel}) = T_{\uparrow\downarrow} + T_{np\uparrow\downarrow} + V_{\uparrow\downarrow} + V_{so\uparrow\downarrow}, \quad (4.23)$$

onde os valores esperados  $T_{\uparrow\downarrow}$ ,  $T_{np\uparrow\downarrow}$ ,  $V_{\uparrow\downarrow}$  e  $V_{so\uparrow\downarrow}$  serão calculados nas regiões de barreira ( $z \leq 0$ ) e de poço ( $z \geq 0$ ), ou seja, teremos  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^{(i)} = (\bar{\varepsilon}_{\uparrow\downarrow})^{(i)} + (\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^*)^{(i)} = \langle f_1^{\uparrow\downarrow} | H_R^{(i)} | f_1^{\uparrow\downarrow} \rangle + \langle f_2^{\uparrow\downarrow} | H_R^{(i)} | f_2^{\uparrow\downarrow} \rangle$ , de acordo com a notação da Tabela 4.2, como resultado dos seguintes integrais<sup>12</sup>:

$$T_{\uparrow\downarrow} = \left\langle \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{\bar{m}_1} \Theta(-z) + \frac{1}{m_2^*} \Theta(z) \right) \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right) \right\rangle_{\uparrow\downarrow}, \quad (4.24)$$

$$T_{np\uparrow\downarrow} = \left\langle -a \frac{\left[ \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right) \right]^2}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}} \Theta(z) \right\rangle_{\uparrow\downarrow}, \quad (4.25)$$

$$V_{\uparrow\downarrow} = \langle e\mathcal{E}z + v_0\Theta(-z) \rangle_{\uparrow\downarrow} \quad (4.26)$$

e

$$V_{so\uparrow\downarrow} = \langle \mp (\bar{\alpha}_1 \Theta(-z) + \alpha_2^* \Theta(z)) k_{\parallel} \rangle_{\uparrow\downarrow}. \quad (4.27)$$

Tabela 4.2 - Resultados dos integrais  $\langle f_1^{\uparrow\downarrow} | f_1^{\uparrow\downarrow} \rangle$ ,  $\langle f_2^{\uparrow\downarrow} | f_2^{\uparrow\downarrow} \rangle$  e dos valores esperados  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^{(i)} = (\bar{\varepsilon}_{\uparrow\downarrow})^{(i)} + (\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^*)^{(i)}$ .

$\langle f_1^{\uparrow\downarrow}   f_1^{\uparrow\downarrow} \rangle$	$\frac{A_{\uparrow\downarrow}^2}{k_0}$
$\langle f_2^{\uparrow\downarrow}   f_2^{\uparrow\downarrow} \rangle$	$B_{\uparrow\downarrow}^2 \left( \frac{2}{b^3} + \frac{2c_{\uparrow\downarrow}}{b^2} + \frac{c_{\uparrow\downarrow}^2}{b} \right)$
$\bar{T}_{\uparrow\downarrow}$	$\frac{\hbar^2}{2\bar{m}_1} \left( -A_{\uparrow\downarrow}^2 \frac{k_0}{4} + \langle f_1^{\uparrow\downarrow}   f_1^{\uparrow\downarrow} \rangle k_{\parallel}^2 \right)$
$T_{\uparrow\downarrow}^*$	$\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \left[ B_{\uparrow\downarrow}^2 \left( \frac{1}{2b} + \frac{c_{\uparrow\downarrow}}{2} - \frac{bc_{\uparrow\downarrow}^2}{4} \right) + \langle f_2^{\uparrow\downarrow}   f_2^{\uparrow\downarrow} \rangle k_{\parallel}^2 \right]$
$\bar{V}_{\uparrow\downarrow}$	$v_0 \langle f_1^{\uparrow\downarrow}   f_1^{\uparrow\downarrow} \rangle - e\mathcal{E} \frac{A_{\uparrow\downarrow}^2}{k_0^2}$
$V_{\uparrow\downarrow}^*$	$e\mathcal{E} B_{\uparrow\downarrow}^2 \left( \frac{6}{b^4} + 4 \frac{c_{\uparrow\downarrow}}{b^3} + \frac{c_{\uparrow\downarrow}^2}{b^2} \right)$
$T_{np\uparrow\downarrow}^*$	$-a \frac{\hbar^4 / 4m_2^{*2}}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}} \left[ \frac{B_{\uparrow\downarrow}^2 b}{8} \left( \frac{c_{\uparrow\downarrow}^2 b^2}{2} - 3c_{\uparrow\downarrow} b - 3 \right) + B_{\uparrow\downarrow}^2 \left( \frac{1}{b} + c_{\uparrow\downarrow} - \frac{bc_{\uparrow\downarrow}^2}{2} \right) k_{\parallel}^2 + \langle f_2^{\uparrow\downarrow}   f_2^{\uparrow\downarrow} \rangle k_{\parallel}^4 \right]$
$\bar{V}_{so\uparrow\downarrow}$	$\mp \bar{\alpha}_1 \langle f_1^{\uparrow\downarrow}   f_1^{\uparrow\downarrow} \rangle k_{\parallel}$
$V_{so\uparrow\downarrow}^*$	$\mp \alpha_2^* \langle f_2^{\uparrow\downarrow}   f_2^{\uparrow\downarrow} \rangle k_{\parallel}$

<sup>11</sup> Considerando  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k_{\parallel}) = \langle H_R \rangle_{\uparrow\downarrow} = \sum_i \langle H_R^{(i)} \rangle_{\uparrow\downarrow} = \sum_i \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^{(i)}$ .

<sup>12</sup>  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^{(i)} = (\bar{\varepsilon}_{\uparrow\downarrow})^{(i)} + (\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^*)^{(i)} = \int_{-\infty}^0 f_1^{\uparrow\downarrow}(z) H_R^{(i)} f_1^{\uparrow\downarrow}(z) dz + \int_0^{\infty} f_2^{\uparrow\downarrow}(z) H_R^{(i)} f_2^{\uparrow\downarrow}(z) dz$ .

Observe que, de forma geral, utilizamos as autofunções  $f_{\uparrow}(z)$  e  $f_{\downarrow}(z)$  para calcular os valores esperados  $\varepsilon_{\uparrow}^i$  e  $\varepsilon_{\downarrow}^i$  de  $H_R^{(i)}$  (i-ésimo termo do Hamiltoniano 4.14). Assim, em nossa formulação do problema, cada termo mostrado na Tabela 4.2 terá sua parcela de contribuição, em relação ao *spin-splitting* total, dada pela diferença entre o valores esperados de tal termo quando calculados com  $f_{\uparrow}(z)$  e com  $f_{\downarrow}(z)$ , isto é,

$$\delta\varepsilon_i = \langle H_R^{(i)} \rangle_{\uparrow} - \langle H_R^{(i)} \rangle_{\downarrow}. \quad (4.28)$$

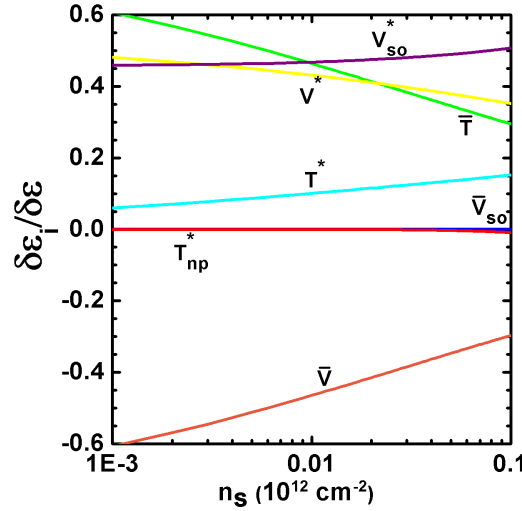


Figura 4.4 - Mostra o peso de cada contribuição (da Tabela 4.2) em relação à energia (total)  $\Delta_R$  que separa os estados  $|f_{\uparrow}^{bmin}\rangle$  e  $|f_{\downarrow}^{bmin}\rangle$ , e seu comportamento em função da densidade eletrônica superficial.

Assim, na medida em que o *spin-splitting*  $\Delta_R$  entre os estados  $|f_{\uparrow}^{bmin}\rangle$  e  $|f_{\downarrow}^{bmin}\rangle$  varia continuamente com a densidade de carga, algumas de suas contribuições tornam-se dominantes, enquanto que outras podem ser desprezadas. O peso de cada contribuição, considerando  $\Delta_R = \sum_i \delta\varepsilon_i \geq 0$ , está mostrado na Fig. 4.4 e a notação utilizada para designar a i-ésima contribuição ( $\delta\varepsilon_i = \varepsilon_{\downarrow}^i - \varepsilon_{\uparrow}^i$ ) está de acordo com a Tabela 4.2. Pode ser observado que, para o sistema descrito pela Fig. 4.3 (a), uma pequena diferença entre as amplitudes  $f_{\uparrow}(z)$  e  $f_{\downarrow}(z)$  (diferença que pode ser vista com detalhes no *inset* superior da Fig. 4.3 (a)) é responsável por um aumento significativo no *spin-splitting* para estados com a energia de Fermi (como pode ser observado no *inset* inferior da Fig. 4.3 (a)). Na aproximação de barreira perfeitamente isolante, situação para qual a amplitude de onda não depende do grau de liberdade de spin, apenas uma das contribuições  $\delta\varepsilon_i$  será não nula, ou seja,  $\Delta_R(k_{\parallel}) = |\sum_i \delta\varepsilon_i| = |V_{SO\uparrow}^* - V_{SO\downarrow}^*| = 2\alpha_2^* k_{\parallel}$ . Nessa situação, conforme discutimos na introdução desta tese, o *spin-splitting* pode ser trivialmente calculado, pois o parâmetro de acoplamento SO apresenta uma dependência linear com a densidade eletrônica superficial.

#### 4.4 Energia de Fermi

Com o sistema em seu estado fundamental não-degenerado, a primeira subbanda pertencente à banda de condução estará desdobrada em duas subbandas denotadas por  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k_{\parallel})$ ; ou seja, elétrons em estados com um mesmo valor de  $k_{\parallel}$ , mas com spins opostos, terão energias dadas por  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k_{\parallel})$ . Na medida em que a densidade eletrônica cresce, cada elétron adicionado ocupará sempre o estado de menor energia possível, isto é, ocupará o estado com menor valor possível de  $k_{\parallel}$ , cuja degenerescência é dada por um círculo de raio  $k_{\parallel}$ . Para cada valor de  $n_s$ , o último nível de energia preenchido corresponde à energia de Fermi (que estamos denotando por  $\varepsilon_F$ ). Associamos um vetor de Fermi ( $k_F$ ) para cada valor da energia de Fermi, de forma que a densidade eletrônica superficial ( $n_s$ ) está relacionada com a área interior ao círculo de raio  $k_F$ . Desprezando efeitos de temperatura ( $T = 0 K$ ), as populações  $n_{\uparrow\downarrow}$  das subbandas  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k_F)$ , onde temos que  $n_{\uparrow} + n_{\downarrow} = n_s$ , são dadas por

$$n_{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} \Theta[\varepsilon_F - \varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k)] = \frac{k_{F\uparrow\downarrow}^2}{4\pi}. \quad (4.29)$$

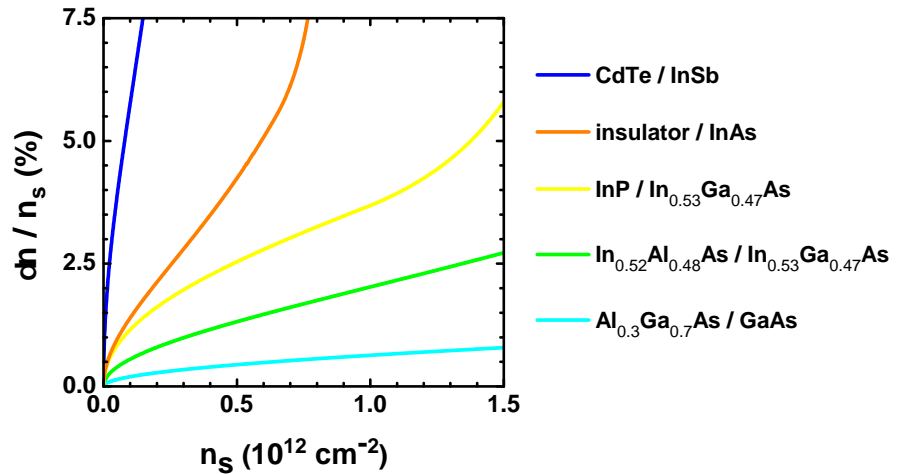


Figura 4.5 - Diferença relativa entre as subpopulações  $n_{\uparrow}$  e  $n_{\downarrow}$  em função da densidade eletrônica superficial. Para as diferentes heterojunções consideradas, os resultados estão indicados por cores, de acordo com a legenda adjacente, enquanto que os parâmetros utilizados estão presentes na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 - Parâmetros utilizados para as diferentes heterojunções (DAVIES, 1998; JANCU et al., 2005).

	$E_g^{(1)}$ (eV)	$\Delta^{(1)}$ (eV)	$v_0$ (meV)	$E_g^{(2)}$ (eV)	$\Delta^{(2)}$ (eV)	$m_2^*(m_e)$	$\varepsilon_{sc}$
<i>CdTe/InSb</i>	1.590	0.800	550	0.240	0.810	0.015	16.8
<i>insulator/InAs</i>	-	-	$\infty$	0.418	0.380	0.023	12.2
<i>InP/InGaAs</i>	1.423	0.107	250	0.813	0.326	0.041	13.1
<i>InAlAs/InGaAs</i>	1.513	0.309	500	0.813	0.326	0.041	13.1
<i>AlGaAs/GaAs</i>	1.893	0.334	269	1.519	0.340	0.067	12.9

## 4.5 Aproximação de barreira perfeitamente isolante

Na aproximação de barreira infinita, recuperamos o formalismo variacional de Fang-Howard e o parâmetro de acoplamento SO obtido por de Andrada e Silva et al (SILVA et al., 1994). Fazendo  $v_0 \rightarrow \infty$ , verificamos os seguinte limites:  $k_0 \rightarrow \infty$ ,  $c_{\uparrow\downarrow} \rightarrow 0$ ,  $\langle v_0 \Theta(-z) \rangle_{\uparrow\downarrow} \rightarrow 0$ ,  $B_{\uparrow\downarrow}^2 \rightarrow b^3/2$  e  $\langle z \rangle_{\uparrow\downarrow} \rightarrow 3/b$ . Por fim, substituindo esses resultados na Eq. 4.23, segue que

$$\varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k_{\parallel}) = \frac{\hbar^2}{2m_2^*} \left( \frac{b^2}{4} + k_{\parallel}^2 \right) - a \frac{\hbar^4/4m_2^{*2}}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}} \left( -\frac{3b^4}{16} + \frac{b^2 k_{\parallel}^2}{2} + k_{\parallel}^4 \right) + \frac{3e\mathcal{E}}{b} \mp \alpha_2^* k_{\parallel}. \quad (4.30)$$

Imediatamente temos que

$$\Delta_R(k_{\parallel}) = 2\alpha_2^* k_{\parallel} \quad (4.31)$$

onde  $\alpha_2^*$  é dado pela Eq. 4.12 e, portanto, o parâmetro de acoplamento SO depende linearmente da densidade eletrônica superficial e o coeficiente dessa relação é uma característica exclusiva do material do poço (depende apenas dos parâmetros do material 2). A Fig.4.6

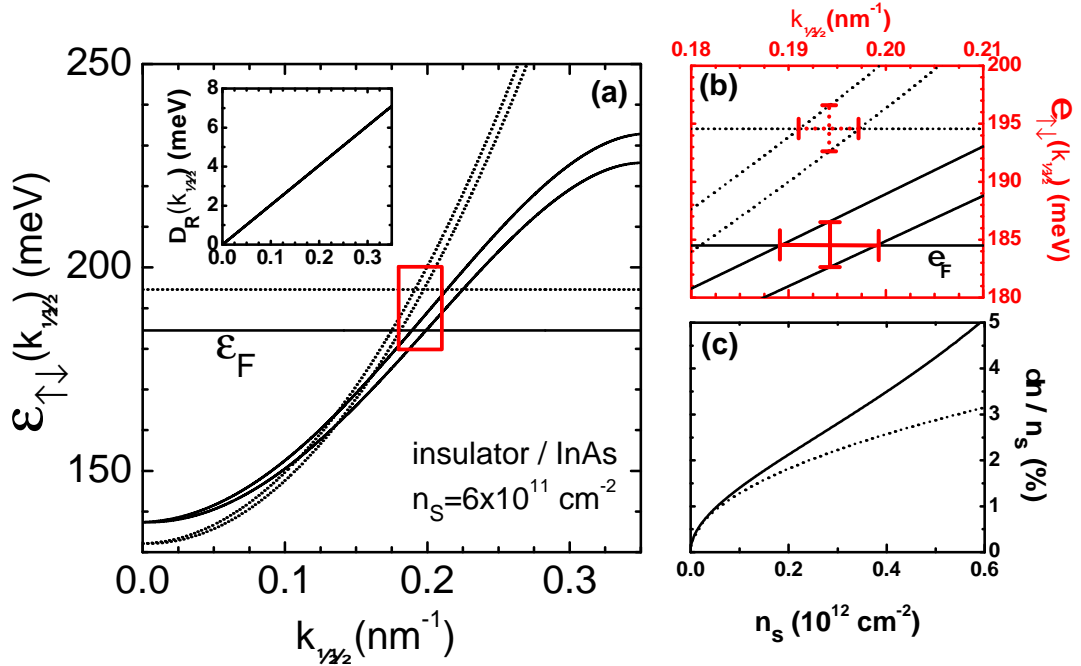


Figura 4.6 - (a) Mostra a relação de dispersão para estados (spin up e down) de condução, o nível de Fermi e o *inset* mostra o *spin-splitting* em função do módulo do vetor de onda no plano. (b) Expande a região pertencente à Fig. 4.6(a), delimitada pela curva em vermelho. (c) Mostra a diferença relativa entre as populações das subbandas para estados com spin up e down.

mostra resultados para uma heterojunção em que a aproximação de barreira infinita se aplica com maior precisão. Observe que o efeito de não-parabolicidade, embora não tenha influência direta sobre o *spin-splitting* (veja a Fig.4.6(b)), afeta sensivelmente a inclinação das curvas  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}(k_{\parallel})$ , favorecendo a diferença entre as populações  $n_{\uparrow}$  e  $n_{\downarrow}$  (veja a Fig.4.6(C)).



## 5 EFEITO DRESSELHAUS

No âmbito de desenvolvimento dos transistores de spin (AWSCHALOM; SAMARTH, 2009), interessa conhecer quais heterointerfaces favorecem a modulação da intensidade do acoplamento SO com a densidade eletrônica superficial, de acordo com a direção de propagação do elétron sobre o plano  $x - y$ . Sabe-se que a intensidade do acoplamento SO apresenta uma anisotropia característica exclusiva da estrutura, pois ocorre enquanto resultado da superposição dos termos de Rashba e Dresselhaus, onde os potenciais de confinamento (em nível mesoscópico) e cristalino (em nível microscópico) atuam sobre os estados de condução, promovidos por uma transformação de Lorentz, à semelhança de um campo magnético cuja intensidade depende da direção cristalina (SILVA, 1992; WINKLER, 2004). Sabe-se que o termo de Dresselhaus (DRESSELHAUS, 1955) está além do modelo de Kane  $8 \times 8$ , de forma que seus efeitos podem ser introduzidos por meio da teoria de perturbação (EPPENGA; SCHUURMANS, 1988), considerando o seguinte hamiltoniano:

$$H_D = \gamma(z)[\sigma_x k_x(k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y(k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z(k_x^2 - k_y^2)], \quad (5.1)$$

onde  $x$ ,  $y$  e  $z$  correspondem respectivamente às direções cristalográficas  $[100]$ ,  $[010]$  e  $[001]$ . A diagonalização do Hamiltoniano 5.1 é imediata, seus autovalores definem o *spin-splitting*,

$$\Delta_D(k_{\parallel}, \vartheta) = 2\gamma k_{\parallel} \sqrt{\langle k_z^2 \rangle^2 + (k_{\parallel}^2/4 - \langle k_z^2 \rangle)k_{\parallel}^2 \sin^2 2\vartheta}. \quad (5.2)$$

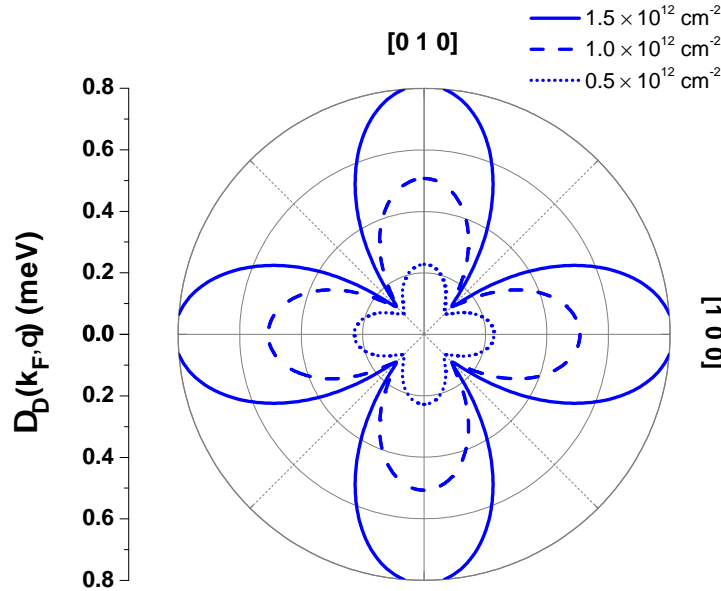


Figura 5.1 - Desdobramento de energia provocado pelo acoplamento Dresselhaus ( $\Delta_D(k_{\parallel}, \vartheta) = \hbar |\mathbf{B}_D(k_{\parallel}, \vartheta)|$ ), para estados no nível de Fermi em uma heterojunção (insulator/GaAs), obtido através do formalismo variacional de Fang-Howard para três valores específicos da densidade eletrônica superficial.

## 5.1 Anisotropia spin-órbita

Seguindo a proposta de Eppenga e Schuurmans (EPPENGA; SCHUURMANS, 1988), vamos utilizar a teoria de perturbação quase degenerada para incluir o efeito Dresselhaus sobre os estados de condução em uma heterojunção semicondutora, já levando em conta o acoplamento Rashba, os efeitos de não parabolicidade, da penetração da função de onda na região de barreira e sua conexão com a renormalização dos parâmetros. Para tanto, como ponto de partida, considere a base formada pelos os auto-estados  $\{|\Psi_{\uparrow\downarrow}^R\rangle\}$ , ou seja,

$$H_R|\Psi_{\uparrow\downarrow}^R\rangle = \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R(k_{\parallel})|\Psi_{\uparrow\downarrow}^R\rangle, \quad (5.3)$$

onde o hamiltoniano efetivo  $H_R$  é dado pela Eq. (4.14) e

$$|\Psi_{\uparrow\downarrow}^R\rangle = e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}}|f_{\uparrow\downarrow}^b(z)\rangle\chi_{\uparrow\downarrow}(\vartheta) \quad (5.4)$$

com

$$\chi_{\uparrow}(\vartheta) = \begin{bmatrix} \cos(\vartheta/2) \\ -i \sin(\vartheta/2) \end{bmatrix} \quad \chi_{\downarrow}(\vartheta) = \begin{bmatrix} -i \sin(\vartheta/2) \\ \cos(\vartheta/2) \end{bmatrix}.$$

Os índices  $\uparrow$  e  $\downarrow$  identificam, de forma respectiva, autoestados com spins up e down sobre a direção perpendicular ao vetor de onda no plano  $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_{\parallel}, \vartheta)$ . O spinores  $\chi_{\uparrow\downarrow}$  dependem apenas do ângulo, denotado por  $\vartheta$ , definido entre  $\mathbf{k}_{\parallel}$  e a direção cristalina  $[100]$ . As auto-funções  $|f_{\uparrow\downarrow}^b(z)\rangle$  são dadas pela Eq. (4.17). Por fim, o desdobramento da energia depende apenas do módulo de  $\mathbf{k}_{\parallel}$ :

$$\Delta_R(k_{\parallel}) = |\varepsilon_{\uparrow}^R(k_{\parallel}) - \varepsilon_{\downarrow}^R(k_{\parallel})|. \quad (5.5)$$

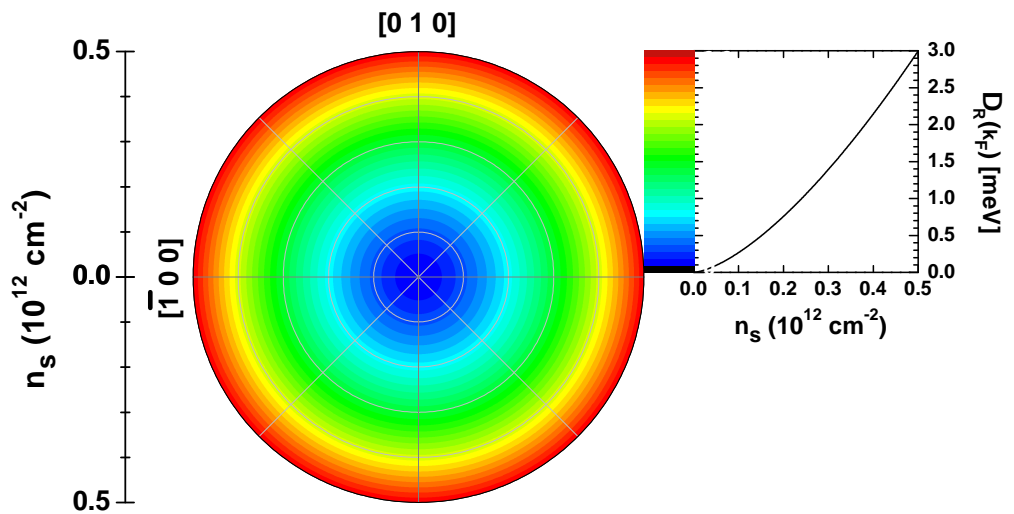


Figura 5.2 - Em escala de cores, apresentamos a variação isotrópica do *splitting* Rashba em função da densidade eletrônica superficial, para uma heterojunção do tipo *insulator/InAs*. O painel superior apresenta o valor exato da separação de energia para cada valor da densidade eletrônica superficial.

Em nível estrutural<sup>1</sup>, no caso de uma heterojunção semicondutora, pode-se dizer que o perfil de condução preserva a simetria de rotação em torno da direção de crescimento<sup>2</sup>. Assim, conforme pode ser observado na Figura 5.2, o desdobramento Rashba é isotrópico em relação ao plano  $k_x - k_y$ , isto é, a sua intensidade não depende da direção de  $\mathbf{k}_{\parallel}$ . A Fig. 5.2 mostra intensidade do desdobramento Rashba, representada em escala de cores, em função da densidades eletrônica superficial. O painel superior apresenta o valor exato do desdobramento de energia para cada valor da densidade de carga. Importante salientar que no caso de uma heterojunção composta por *InAs* (considerando a aproximação de barreira perfeitamente isolante, ou seja, para o caso mostrado na Fig. 5.2), o acoplamento Rashba é particularmente forte, de forma que a influência do termo de Dresselhaus, nessa estrutura, é completamente suprimida. Em outras estruturas, no entanto, mostra-se que interferência promovida pelo termo de Dresselhaus é absolutamente relevante, quando sua influência é forte o suficiente a ponto de deteriorar a isotropia característica do desdobramento Rashba; em tais casos, pode-se estudar o efeito do acoplamento Dresselhaus sobre os estados de condução em heterojunções semicondutoras, utilizando teoria de perturbação quase degenerada (SANDOVAL et al., 2013). Seja o hamiltoniano  $H = H_R + H_D$ , onde  $H_R$  é o hamiltoniano não-perturbado dado pela Eq. (4.14) e  $H_D$  é dado pela Eq. (5.1). Por fim, considere a representação matricial de  $H$  na base  $\{|\Psi_{\uparrow\downarrow}^R\rangle\}$  formada pelos autoestados de  $H_R$ . Com efeito, temos

$$H_{2\times 2} = \begin{bmatrix} H_{\uparrow\uparrow} & H_{\uparrow\downarrow} \\ H_{\downarrow\uparrow} & H_{\downarrow\downarrow} \end{bmatrix}$$

onde

$$H_{\uparrow\uparrow} = \langle \Psi_{\uparrow}^R | H | \Psi_{\uparrow}^R \rangle = \varepsilon_{\uparrow}^R(k_{\parallel}) + \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} k_{\parallel} \sin 2\vartheta - \frac{1}{2} \langle \gamma(z) \rangle_{\uparrow\uparrow} k_{\parallel}^3 \sin 2\vartheta, \quad (5.6)$$

$$H_{\downarrow\downarrow} = \langle \Psi_{\downarrow}^R | H | \Psi_{\downarrow}^R \rangle = \varepsilon_{\downarrow}^R(k_{\parallel}) - \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\downarrow\downarrow} k_{\parallel} \sin 2\vartheta + \frac{1}{2} \langle \gamma(z) \rangle_{\downarrow\downarrow} k_{\parallel}^3 \sin 2\vartheta \quad (5.7)$$

e

$$H_{\uparrow\downarrow} = \langle \Psi_{\uparrow}^R | H | \Psi_{\downarrow}^R \rangle = i \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\downarrow} k_{\parallel} \cos 2\vartheta = H_{\downarrow\uparrow}^*. \quad (5.8)$$

Os auto-valores de  $H_{2\times 2}$  são tais que

$$\varepsilon_{\pm}^{RD}(k_{\parallel}, \vartheta) = \varepsilon(k_{\parallel}, \vartheta) \pm \frac{1}{2} \Delta_s(k_{\parallel}, \vartheta) \quad (5.9)$$

onde

$$\varepsilon(k_{\parallel}, \vartheta) = \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon_{\uparrow}^R(k_{\parallel}) + \varepsilon_{\downarrow}^R(k_{\parallel}) + \left[ \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\downarrow\downarrow} - \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} + \frac{1}{2} (\langle \gamma(z) \rangle_{\uparrow\uparrow} - \langle \gamma(z) \rangle_{\downarrow\downarrow}) k_{\parallel}^2 \right] k_{\parallel} \sin 2\vartheta \right\} \quad (5.10)$$

<sup>1</sup>Escala dita mesoscópica.

<sup>2</sup>Geralmente definida sobre o eixo  $z$ .

e

$$\Delta_s(k_{\parallel}, \vartheta) = \left\{ \left[ \Delta_R(k_{\parallel}) - \left[ \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} + \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\downarrow\downarrow} - \frac{1}{2} (\langle \gamma(z) \rangle_{\uparrow\uparrow} + \langle \gamma(z) \rangle_{\downarrow\downarrow}) k_{\parallel}^2 \right] k_{\parallel} \sin 2\vartheta \right]^2 + 4 \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\downarrow}^2 k_{\parallel}^2 \cos^2 2\vartheta \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (5.11)$$

Para calcular os elementos de matriz acima devemos levar em conta que  $\gamma$  é um parâmetro característico do *bulk* (JANCU et al., 2005), assim  $\gamma(z)$  deve ser modulada pela função de Heaviside segundo a direção de crescimento e os integrais  $\langle \gamma(z) \rangle_{\sigma\sigma'} = \int_{-\infty}^{\infty} f_{\sigma}^{b*}(z) \gamma(z) f_{\sigma'}^b(z) dz$  e  $\langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\sigma\sigma'} = \int_{-\infty}^{\infty} f_{\sigma}^{b*}(z) (-id/dz) \gamma(z) (-id/dz) f_{\sigma'}^b(z) dz$  devem ser calculados seguindo o procedimento desenvolvido por Eppenga e Schuurmans (EPPENGA; SCHUURMANS, 1988).

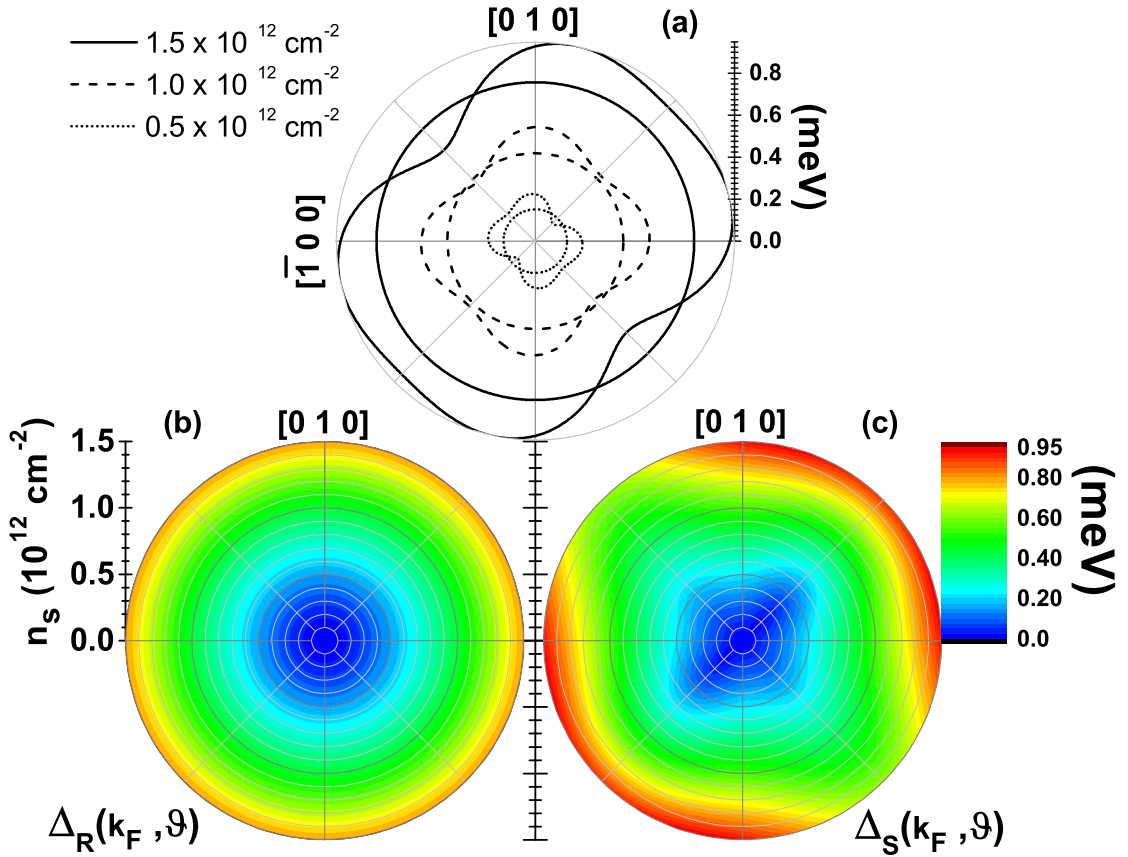


Figura 5.3 - (a) As circunferências (linhas contínua, tracejada e pontilhada) mostram o *splitting* de energia promovido pelo acoplamento Rashba para diferentes valores da densidade de carga (de acordo com a legenda). Também é mostrado o *splitting* de energia decorrente da interferência entre os termos de Rashba e Dresselhaus, em função da direção cristalina. (b) Com os valores para a energia apresentados em escala de cores, temos o *splitting* Rashba, calculado para estados com o vetor de Fermi, em função da densidade de carga e da direção cristalina. (c) Mostra a perturbação promovida pelo termo de Dresselhaus rompendo a isotropia característica do acoplamento Rashba. Os presentes resultados são para a heterojunção  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ . Os parâmetros  $m^*$ ,  $E_g$ ,  $\Delta$  e  $v_0$  constam na Tab.4.3, enquanto que  $\gamma$  está de acordo com a Referência (JANCU et al., 2005).

Observe que o efeito de penetração da função de onda sobre a região de barreira é responsável pela anisotropia presente na relação de dispersão de acordo com a Eq. 5.10. Conforme discutimos inicialmente, o desdobramento de energia (dado pela Eq. 5.11) é resultado da superposição entre o acoplamento Rashba e o acoplamento Dresselhaus e, portanto, pode ser associado com o campo magnético efetivo oriundo da interferência entre esses termos, ou seja,  $\Delta_s(k_{\parallel}, \vartheta) = \hbar|\mathbf{B}_{eff}(k_{\parallel}, \vartheta)|$ . Em uma região de interface, a imposição estrita das condições de contorno determina o efeito de penetração de função de onda sobre a região de barreira de tal maneira que as contribuições referentes aos termos de Rashba e Dresselhaus não podem ser completamente dissociadas<sup>3</sup>. Por conseguinte, a anisotropia que caracteriza o desdobramento da energia para estados no nível de Fermi não pode ser determinada por apenas um parâmetro<sup>4</sup>, a despeito do que ocorre quando consideramos o limite de barreira infinita (onde temos  $\langle \gamma(z)k_z^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} = \langle \gamma(z)k_z^2 \rangle_{\uparrow\downarrow} = \langle \gamma(z)k_z^2 \rangle_{\downarrow\downarrow} = \beta$ ) e a aproximação linear para o termo de Dresselhaus, situação para qual a anisotropia fica usualmente caracterizada, ou seja,  $\Delta_s(k_{\parallel}, \vartheta) = \hbar|\mathbf{B}_{eff}(\mathbf{k}_{\parallel})| = 2k_{\parallel}\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta\sin 2\vartheta}$ .

Os autoestados permitidos para elétrons, denotados por  $|\Psi_{\pm}^{RD}(\mathbf{k}_{\parallel})\rangle$ , obtidos em correspondência aos autovalores  $\varepsilon_{\pm}^{RD}(k_{\parallel}, \vartheta)$ , são tais que

$$|\Psi_{\pm}^{RD}(\mathbf{k}_{\parallel})\rangle = \frac{|H_{\uparrow\downarrow}|}{\sqrt{|H_{\uparrow\downarrow}|^2 + (\varepsilon_{\pm}^{RD}(k_{\parallel}, \vartheta) - H_{\uparrow\uparrow})^2}} \begin{bmatrix} 1 \\ H_{\uparrow\downarrow}^* (\varepsilon_{\pm}^{RD}(k_{\parallel}, \vartheta) - H_{\uparrow\uparrow}) / |H_{\uparrow\downarrow}|^2 \end{bmatrix}.$$

Os índices + e - indicam autoestados cujos spins estão orientados, em sentidos opostos, segundo a direção de polarização dada pelo valor esperado do operador de spin<sup>5</sup>, isto é,

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{k}_{\parallel}) \rangle_{\pm} = \langle \Psi_{\pm}^{RD}(\mathbf{k}_{\parallel}) | \mathbf{S} | \Psi_{\pm}^{RD}(\mathbf{k}_{\parallel}) \rangle. \quad (5.12)$$

Evidentemente, a polarização dependerá tanto do módulo quanto da orientação do vetor de onda sobre o plano cristalográfico. Por fim, a evolução do valor esperado do operador de spin, ou seja, a chamada dinâmica de spin, pode ser descrita pela equação de precessão. Com efeito,

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{S} \rangle = -\mathbf{B}_{eff}(\mathbf{k}_{\parallel}) \times \langle \mathbf{S} \rangle. \quad (5.13)$$

Então, o vetor polarização de spin  $\langle \mathbf{S} \rangle$  precessiona em torno do campo magnético efetivo  $\mathbf{B}_{eff}(\mathbf{k}_{\parallel})$ , todavia, neste caso a frequência angular de precessão é dada por  $|\mathbf{B}_{eff}(\mathbf{k}_{\parallel})|$ .

<sup>3</sup>O acoplamento Rashba manifesta-se já nas condições de contorno (Eqs. 4.15 e 4.16) e, como resultado, perturbações distinguem os valores esperados dos observáveis para diferentes autoestados de spin.

<sup>4</sup>No limite de barreira infinita, assumindo o hamiltoniano de Dresselhaus na aproximação linear, a anisotropia que caracteriza o desdobramento da energia para estados no nível de Fermi fica determinada pela razão entre os parâmetros de acoplamento Rashba ( $\alpha$ ) e Dresselhaus ( $\beta$ ).

<sup>5</sup>Note que o operador de spin é proporcional ao operador de Pauli, isto é,  $\mathbf{S} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$ .

## 5.2 Cálculo das subpopulações

Conforme vimos no capítulo anterior, para cada valor da energia de Fermi (e, consequentemente, da densidade de carga), a população de cada subbanda (spin up e down) pode ser calculada de acordo com a área interior à superfície de Fermi. No caso do acoplamento Rashba, o desdobramento da energia ocorre, sobre o nível de Fermi, de forma isotrópica e, portanto, as populações das subbandas são determinadas pelas áreas delimitadas pelos círculos com respectivos raios dados por  $k_{F\uparrow}$  e  $k_{F\downarrow}$ . Obtemos a diferença entre as subpopulações subtraindo a área do círculo maior pela área do círculo menor (veja, por exemplo, a área preenchida em vermelho presente no painel lateral da Fig. 5.4). Entretanto, a perturbação promovida pelo acoplamento Dresselhaus rompe a isotropia característica do desdobramento Rashba. Então, para cada valor de  $n_s$ , a energia de Fermi fica determinada pela restrição  $n_+ + n_- = n_s$ , onde

$$n_{\pm} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \Theta[\varepsilon_F - \varepsilon_{\pm}(k_{\parallel}, \vartheta)] k_{\parallel} dk_{\parallel} d\vartheta. \quad (5.14)$$

Vamos utilizar, como exemplo, um caso frequentemente discutido na literatura (CUI et al., 2002; YANG et al., 2006; SANDOVAL et al., 2009). A Fig. 5.4 mostra os resultados obtidos para a heterointerface  $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$ . Interessante observar o efeito da anisotropia sobre o cálculo de  $\delta n$ , a área preenchida em azul é sensivelmente menor do que a área preenchida em vermelho. Evidentemente, esse efeito ocorre de maneira única para cada estrutura e, portanto, devemos estudar cada caso respeitando suas particularidades.

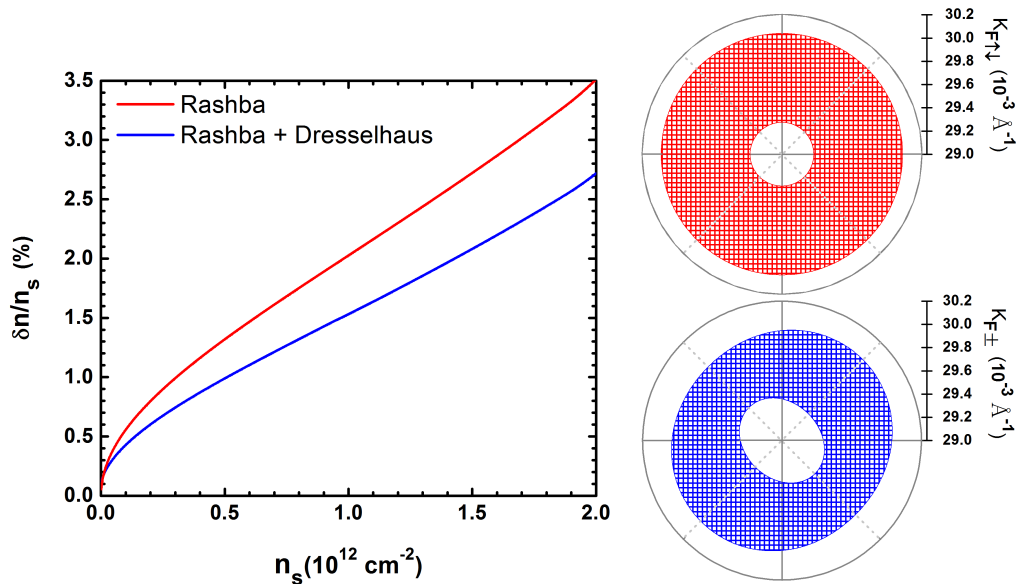


Figura 5.4 - Diferença relativa entre as subpopulações (ocupações das subbandas spin up e down) como função da densidade eletrônica superficial em uma heterojunção  $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$ . Os painéis laterais mostram, correspondentemente, as regiões de integração para  $n_s = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

### 5.3 Considerações finais

A produção de nanoestruturas semicondutoras de excelente qualidade abre espaço para uma investigação minuciosa das propriedades que dependem do spin nesses materiais, fato que motiva o desenvolvimento de técnicas experimentais cada vez mais sofisticadas. A despeito do excepcional avanço obtido pelos experimentos, em alguns casos as diferentes técnicas experimentais desenvolvidas não alcançam um consenso com relação aos resultados obtidos pelas mesmas. Podemos citar um caso extremo, onde duas das principais técnicas de investigação do efeito Rashba, as oscilações Shubnikov-de Haas (SdH) e a localização fraca, apresentam resultados que divergem com relação à dependência do parâmetro de acoplamento SO com a densidade eletrônica superficial (MATSUYAMA et al., 2000; SCHIERHOLZ et al., 2004). A partir das oscilações SdH é possível medir as ocupações das subbandas resolvidas por spin. Os resultados obtidos através dessa técnica são geralmente interpretados com o parâmetro de acoplamento Rashba na aproximação parabólica, ou seja,

$$\alpha_{SdH} = \delta n (\hbar^2/m^*) \sqrt{\pi/2(n_s - \delta n)}, \quad (5.15)$$

onde  $\delta n$  é a diferença entre as ocupações. Esse modelo é utilizado com maior frequência para estruturas onde o acoplamento Rashba predomina, entretanto nessas mesmas estruturas é possível que o efeito de não-parabolicidade seja acentuado (conforme ocorre para o poço de arseneto de índio, como mostrado pela Figura 4.6). Em outros casos, como o exemplo mostrado na Figura 5.4, o acoplamento Dresselhaus não pode ser simplesmente desprezado<sup>6</sup>. Naturalmente, o estudo da anisotropia (SO) requer técnicas experimentais ainda mais delicadas. Nosso modelo prevê consequências importantes para a relação entre o efeito Dresselhaus e o efeito de penetração da função de onda na região de barreira. A primeira delas é que, embora seja possível estimar as contribuições de ambos os termos<sup>7</sup>, isto é, dos termos de Rashba e Dresselhaus, do ponto de vista formal essas contribuições não são completamente dissociáveis. Outra consequência importante é que a dependência da anisotropia com a densidade de carga pode variar de maneira drástica, se levamos em conta o efeito de penetração da função de onda na região de barreira e os termos não-lineares no hamiltoniano de Dresselhaus. Contudo, se consideramos o limite de barreira infinita e a aproximação linear para o hamiltoniano de Dresselhaus, então a anisotropia fica determinada por um único parâmetro e a separação de energia para estados que se propagam nas direções  $[110]$  e  $[1\bar{1}0]$  assume sua expressão mais usual:

$$\Delta_s^{[110]} = |\alpha_{eff} + \beta_{eff}| k_F^{[110]} \quad \text{e} \quad \Delta_s^{[1\bar{1}0]} = |\alpha_{eff} - \beta_{eff}| k_F^{[1\bar{1}0]}. \quad (5.16)$$

<sup>6</sup>Para poço de arseneto de índio, o efeito Dresselhaus pode ser desprezado, como mostrado na Fig. 5.2.

<sup>7</sup>Como, por exemplo, discutido na Ref. (GANICHEV et al., 2004).

Tabela 5.1 - Comparação entre os resultados experimentais e os resultados previstos por nosso modelo.

Referência	Experimental			Teórico	
	$n_s$ ( $10^{11} \text{cm}^{-2}$ )	$\alpha_{SdH}$ ( $10^{-11} \text{eVm}$ )	$\alpha_{eff}/\beta_{eff}$	$\alpha_{SdH}$	$\alpha_{eff}/\beta_{eff}$
(GILBERTSON et al., 2009)	3.1-3.4	1.3-1.6	-	<3.0	-
(GRUNDLER, 2000)	7.5	2.2	-	2.6	-
(YANG et al., 2006)	14.0	0.6	-	0.6	-
(CUI et al., 2002)	27.0	5.0	-	<1.5	-
(FROLOV et al., 2009)	1.1	-	1.4-3.2	-	1.3
(GIGLBERGER et al., 2007)	1.1	-	7.6	-	1.3
(GIGLBERGER et al., 2007)	1.3	-	2.8	-	1.2
(GIGLBERGER et al., 2007)	1.8	-	1.5	-	1.1

Essa formulação do problema mostra-se particularmente conveniente, supondo que seja possível medir a razão  $\alpha_{eff}/\beta_{eff}$ . Então, conhecendo apenas um dos parâmetros, isto é,  $\alpha_{eff}$  ou  $\beta_{eff}$ , a anisotropia SO fica completamente determinada. Em nossa formulação, obtemos  $\alpha_{eff}$  e  $\beta_{eff}$  calculando  $\Delta_s^{[110]}$  e  $\Delta_s^{[1\bar{1}0]}$  a partir da Eq. 5.11, assim reconsideramos os efeitos de não-parabolicidade, de penetração da função de onda na região de barreira e dos termos não-lineares do hamiltoniano de Dresselhaus, com o intuito de possibilitar uma justa interpretação para os resultados provenientes dos diferentes experimentos. Sabe-se que o efeito Dresselhaus torna-se relativamente proeminente em materiais de gap largo, onde o acoplamento Rashba é consideravelmente fraco, de forma que a anisotropia resultante será uma característica exclusiva da estrutura em questão. Na Tabela 5.1 constam alguns resultados experimentais passíveis de comparação com os resultados previstos pelo nosso modelo. Seguindo a ordem apresentada na tabela, Gilbertson *et al.* (GILBERTSON et al., 2009) determinam o coeficiente  $\alpha_{SdH}$  a partir de medidas das oscilações SdH para um poço quântico de *InSb*. Entretanto, sabe-se que ligas constituídas por *InSb* apresentam o efeito de não-parabolicidade extremamente acentuado. Além disso, nesses mesmos materiais o nível de Fermi cresce rapidamente com a densidade eletrônica e alcança, ainda no domínio de baixos valores da densidade, o ponto de inflexão que caracteriza a relação de dispersão não-parabólica, estabelecendo assim o limite de validade para nossas previsões. Embora o resultado teórico que apresentamos na Tabela 5.1 tenha sido obtido pela extrapolação do modelo aqui desenvolvido (ou seja,  $\alpha_{SdH} < 3.0 \times 10^{-11} \text{eVm}$ ), deve-se ressaltar a importância da conexão entre o efeito de penetração de barreira e o acoplamento Dresselhaus para essa estrutura (ou seja, para uma heterointerface do tipo *InAlSb/InSb*). De maneira semelhante ao que ocorre para o caso mostrado na Fig. 5.4, o acoplamento Dresselhaus provoca a redução do coeficiente  $\alpha_{SdH}$ . Contudo, é possível verificar que o efeito Dresselhaus é completamente suprimido na aproximação de barreira infinita, onde o máximo confinamento favorece o efeito Rashba. Por outro lado, o efeito de penetra-



ção de barreira implica na redução do confinamento, de maneira que o efeito Dresselhaus torna-se particularmente importante na medida em que o confinamento diminui. Assim, no limite em que a altura da barreira vai a zero, ou seja, no limite de *bulk*, restará apenas o efeito decorrente do acoplamento Dresselhaus. Em outro trabalho que exemplifica a importância do efeito de não-parabolicidade sobre o parâmetro de acoplamento SO, Grundler investiga experimentalmente o efeito Rashba em um poço quântico constituído por *InAs* (GRUNDLER, 2000). No trabalho em questão, a partir de uma medida da diferença entre as subpopulações  $n_+$  e  $n_-$ , o autor apresenta o valor obtido para o parâmetro de acoplamento  $\alpha_{SdH}$  (ou seja, o autor utiliza a Eq. 5.15 com o valor experimental obtido para  $\delta n$ ) e compara o resultado com o parâmetro de acoplamento ( $\alpha^*$ ) dado pela expressão 1.17. Para  $n_s = 7.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , os resultados apresentados foram  $\alpha_{SdH} = 2.2 \times 10^{-11} \text{ eVm}$  e  $\alpha^* = 1.1 \times 10^{-11} \text{ eVm}$ . Contudo, o procedimento adotado não favorece uma justa comparação entre teoria e experimento, pois, particularmente para poços quânticos de *InAs*, sabe-se que o efeito de não-parabolicidade possui uma influência significativa sobre o cálculo das subpopulações. Nosso procedimento consiste em utilizar a Eq. 5.14 para calcular  $n_+$  e  $n_-$ , assim calculamos o coeficiente  $\alpha_{SdH}$  por meio da Eq. 5.15 levando em conta o efeito de não-parabolicidade. Como resultado, utilizando  $n_s = 7.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , obtivemos  $\alpha_{SdH} = 2.6 \times 10^{-11} \text{ eVm}$ . Prosseguindo com a análise dos resultados presentes na Tab. 5.1, Yang *et al.* estudaram o efeito Rashba em poços quânticos providos de interfaces do tipo *InAlAs/InGaAs* (YANG *et al.*, 2006), os resultados apresentados nesse trabalho mostram nitidamente o padrão de batimentos característico das oscilações SdH, padrão para o qual a transformada de Fourier fornece as ocupações para as subbandas  $\varepsilon_+(k_{\parallel}, \vartheta)$  e  $\varepsilon_-(k_{\parallel}, \vartheta)$ . O caso em questão é de particular interesse, pois trata de um sistema onde o acoplamento Dresselhaus é frequentemente desprezado. Contudo, o efeito Dresselhaus contribui para o perfeito acordo que obtivemos com relação a um dos resultados experimentais apresentados por Yang *et al.*. Também trabalhos recentes mostram a importância do acoplamento Dresselhaus para o sistema em questão (KOHDA *et al.*, 2012). Para essa mesma estrutura, entretanto, os resultados apresentados por Cui *et al.* assumem outra ordem de grandeza (CUI *et al.*, 2002) e contrastam fortemente não apenas com os resultados previstos pelo nosso modelo, como também com trabalhos experimentais conhecidos para poços quânticos estreitos (ENGELS *et al.*, 1997; SCHÄPERS *et al.*, 1998). Por fim, (GIGLBERGER *et al.*, 2007) e (FROLOV *et al.*, 2009) utilizam diferentes técnicas experimentais para determinar a razão  $\alpha_{eff}/\beta_{eff}$  em poços quânticos de *GaAs*. O confronto estabelecido com nossos resultados mostra que a parametrização usual (obtida na situação limite, onde a anisotropia é determinada por um único parâmetro) não descreve adequadamente o comportamento da anisotropia. Todavia, utilizando as Eqs. 5.16 obtemos um melhor acordo quantitativo com os resultados experimentais e também reproduzimos corretamente a tendência da razão  $\alpha_{eff}/\beta_{eff}$  com a variação da densidade eletrônica superficial (SANDOVAL *et al.*, 2012b).



## 6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Conforme discutimos nesta tese, os fenômenos relacionados ao spin do elétron possuem histórica importância junto ao desenvolvimento da teoria quântica. O spin é uma propriedade fundamental do elétron, além de possuir massa e carga, o elétron também possui um momento de dipolo magnético intrínseco e comporta-se, portanto, como um pequeníssimo ímã. Nas últimas três décadas, ao incluir a possibilidade de controle sobre o grau de liberdade de spin dos portadores, a revolução desencadeada pelo desenvolvimento de materiais estruturados em nanoescala ampliou significativamente o domínio das aplicações estabelecidas pela eletrônica tradicional (FERT, 2008). No âmbito da spintrônica, benefícios em setores críticos da tecnologia da informação estão atrelados à compreensão de aspectos básicos da física quântica e, em particular, do spin dos portadores em sistemas de baixa dimensionalidade, onde, particularmente, as nanoestruturas constituídas por semicondutores não-magnéticos tem recebido especial atenção, principalmente em função da possibilidade de aplicações tecnológicas complementares àquelas já existentes. Amplamente discutidos na literatura especializada, poços, fios e pontos quânticos podem armazenar uma quantidade variável de elétrons confinando-os em duas, uma e zero dimensões. Em tais circunstâncias, os autoestados permitidos para elétrons podem ter a degenerescência de spin levantada pela influência de um campo magnético externo, como no conhecido efeito Zeeman, ou mesmo em decorrência da interação spin-órbita (SO) cujo efeito está geralmente associado a estruturas sem centro de inversão no espaço, caso dos efeitos Dresselhaus e Rashba, onde os potenciais de bulk (em nível microscópico) e de confinamento (em nível mesoscópico) atuam sobre estados de condução, promovidos por uma transformação de Lorentz, à semelhança de um campo magnético cuja intensidade depende da direção cristalina. Ainda no âmbito da spintrônica semicondutora, a interação SO encontra uma aplicação de destaque junto ao transistor de spin, fundamentada sobre a possibilidade de manipulação da precessão do spin do elétron mediada pela modulação da intensidade do acoplamento SO com o confinamento dos elétrons em canais formados em heterojunções semicondutoras. Nesse contexto, a compreensão dos efeitos decorrentes da interação SO adquire grande importância, onde problemas críticos estão relacionados aos mecanismos que promovem a perda de coerência dos autoestados de spin permitidos para elétrons. Assim, interessa conhecer quais estruturas possibilitam a supressão dos mecanismos de relaxação do spin dos portadores, supondo a necessidade de que, na condição de veículo de informação, o spin do portador preserve-se por uma distância superior à escala de funcionamento associada ao dispositivo. Sabe-se, por exemplo, que determinadas estruturas/materiais favorecem a modulação da anisotropia SO, possibilitando a supressão de um importante mecanismo de decoerência (DYAKONOV; PEREL, 1971), na peculiar situação para qual a intensidade do acoplamento SO tende a zero (KORALEK et al., 2009).

Nesta tese, nós apresentemos uma reformulação da teoria de massa efetiva para estados eletrônicos em heteroestruturas semicondutoras, considerando a renormalização do fator- $g$  de spin em função do confinamento eletrônico estrutural e apresentamos uma interpretação física simples para a anisotropia giromagnética observada em poços quânticos semicondutores. Em particular, como um de nossos principais resultados, nossa formulação mostra que o acoplamento Rashba apresenta uma estrutura mais ampla<sup>1</sup>, de forma que, na presença de um campo magnético externo, o acoplamento Rashba contribui com dois termos sobre o hamiltoniano efetivo para estados de condução, sendo um dos termos finito mesmo para estruturas providas de um centro de inversão no espaço<sup>2</sup>. Utilizando teoria de perturbação de primeira ordem, obtivemos o fator  $g$  efetivo e sua anisotropia para poços quânticos semicondutores. Em particular, verificamos que poços compostos por materiais com um menor *gap* de energia tendem a apresentar maiores valores para a anisotropia associada ao fator  $g$  efetivo e que o sinal dessa anisotropia é determinado pela diferença entre os parâmetros de acoplamento SO dos materiais que constituem a barreira e o poço. Em limites específicos, nossas equações reproduzem modelos bem estabelecidos na literatura (MARQUES; SHAM, 1982; GERCHIKOV; SUBASHIEV, 1992; SILVA et al., 1994; KIM et al., 1989; BROZAK et al., 1990; ROTH et al., 1959). No limite de campo magnético nulo, recuperamos o hamiltoniano que descreve de maneira usual o acoplamento Rashba. Nesse limite, nós estudamos o acoplamento Rashba para 2DEGs confinados em diferentes heterojunções, a partir de uma solução variacional dependente de spin para a correspondente equação de massa efetiva. Consideramos o acoplamento Dresselhaus por meio da teoria de perturbação e estudamos a anisotropia SO em função da densidade eletrônica superficial. O modelo desenvolvido evidencia a dependência dos resultados obtidos com os parâmetros dos materiais que compõem a heteroestrutura. Em especial, levando em conta em o efeito de penetração da função de onda sobre a região de barreira, explicitamos a dependência de nossos resultados com o *band-offset* e com os parâmetros dos materiais que constituem a barreira. Em particular, obtivemos resultados para heterojunções compostas por *GaAs*, *InAs*, *InSb* entre outras e constatamos que heterojunções compostas por materiais com menor *gap* de energia, como o *InAs* e o *InSb*, apresentam um acoplamento Rashba dominante, com a supressão total do acoplamento Dresselhaus na aproximação de barreira infinita, situação em que o efeito Rashba também é favorecido pelo máximo confinamento. Na aproximação de barreira infinita, restringindo o acoplamento Dresselhaus ao termo linear, recuperamos o formalismo onde a anisotropia fica caracterizada por apenas um parâmetro. O amplo confronto estabelecido entre nossos resultados e resultados provenientes de diversos experimentos independentes, revela a aplicabilidade do modelo.

---

<sup>1</sup>Ou seja, que vai além do conhecido termo remanescente do limite de campo magnético nulo.

<sup>2</sup>Os dois termos oriundos do acoplamento Rashba apresentam comportamentos distintos, de forma que o efeito de interferência decorrente da superposição desses termos é determinado pela geometria do potencial de confinamento.

Do ponto de vista das perspectivas, estudos recentes evidenciam um avanço significativo rumo ao controle dos mecanismos de relaxação de spin para elétrons em poços quânticos orientados na direção [111] (BALOCCHI et al., 2011; WANG et al., 2013), situação que pode ser teoricamente explorada a partir da solução variacional aqui desenvolvida. Em tal contexto, é de grande interesse o estudo da polarização de spin para elétrons confinados em diferentes heterointerfaces, levando em conta a dependência da anisotropia resultante da interferência Rashba-Dresselhaus com a densidade eletrônica superficial, considerando a conexão entre o acoplamento SO e o efeito de penetração da função envelope sobre a região de barreira, assim como a evolução temporal do vetor polarização de spin de acordo com a Eq. 5.13. Em termos das aplicações voltadas ao estudo do fator  $g$  efetivo e sua anisotropia, o formalismo que desenvolvemos pode ser facilmente aplicado à heterojunções, estruturas de múltiplos poços quânticos e super-redes semicondutoras. Para cada caso, basta conhecermos a solução de ordem zero correspondente<sup>3</sup> e calcularmos o fator- $g$  efetivo via teoria de perturbação de primeira ordem. Assim podemos abordar os efeitos associados ao potencial de confinamento<sup>4</sup> ou mesmo a possibilidade de amplificação/modulação da anisotropia através das diversas interfaces<sup>5</sup> ou em função da escolha das ligas semicondutoras<sup>6</sup>. Contudo, é importante salientar que os cálculos realizados por meio da teoria de perturbação de primeira ordem restringem nossos resultados ao limite de campo magnético baixo e permitem tratar apenas de heteroestruturas na aproximação de banda plana<sup>7</sup>. Podemos transpor tais limitações através da solução numérica do Hamiltoniano 3.4. Dessa forma, podemos considerar a autoconsistência do potencial de confinamento, além de obter a dependência do fator  $g$  efetivo e de sua anisotropia com o módulo do campo magnético. Por fim, temos ainda como perspectiva a extensão do formalismo de renormalização do fator  $g$  de spin para nanofios e pontos quânticos. Para esses casos, com uma redução ainda maior da dimensionalidade do sistema, faz-se necessário um novo desenvolvimento da equação de massa efetiva, onde podemos explorar um grande número de possibilidades, levando em conta as diferentes geometrias e materiais.

---

<sup>3</sup>Para cada caso, a solução de ordem zero corresponde à solução da Eq. 3.7.

<sup>4</sup>No caso das heterojunções, podemos investigar a dependência do fator  $g$  efetivo com a densidade eletrônica superficial ou em função do campo elétrico correspondente.

<sup>5</sup>Especialmente no caso das estruturas de múltiplos poços quânticos e super-redes semicondutoras.

<sup>6</sup>De acordo com a fórmula de Roth, quanto menor for o valor do *gap* de energia associado a uma liga composta por semicondutores dos grupos III e V, maior será o valor do fator  $g$  efetivo para essa liga. Assim, é de se esperar que o fator  $g$  efetivo apresente uma anisotropia acentuada para heteroestruturas compostas, por exemplo, por *InAs* e *InSb*.

<sup>7</sup>Especificamente no caso das heterojunções, podemos obter resultados em primeira aproximação, por meio de um procedimento semelhante ao que utilizamos no estudo do efeito Rashba, eliminando a dependência da massa efetiva e do parâmetro de acoplamento SO com a energia e com a posição, e utilizando a função variacional de Fang e Howard como solução para equação de massa efetiva.



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANDO, T.; FOWLER, A. B.; STERN, F. Electronic properties of two-dimensional systems. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 54, p. 437–672, Apr 1982. [17](#), [67](#)
- ASHCROFT, N.; MERMIN, N. **Solid state physics**. [S.l.]: Saunders College, 1976. (Science: Physics). [11](#), [13](#), [34](#), [35](#), [36](#), [37](#), [38](#)
- AWSCHALOM, D.; SAMARTH, N. Spintronics without magnetism. **Physics**, American Physical Society, v. 2, p. 50, Jun 2009. [18](#), [73](#)
- BALOCCHI, A.; DUONG, Q. H.; RENUCCI, P.; LIU, B. L.; FONTAINE, C.; AMAND, T.; LAGARDE, D.; MARIE, X. Full electrical control of the electron spin relaxation in GaAs quantum wells. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 107, n. 13, p. 136604, Sep 2011. [85](#)
- BASTARD, G. **Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures**. [S.l.]: Les Éditions de Physique, 1988. (Monographies de physique). [18](#), [39](#), [49](#), [67](#)
- 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. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 64, n. 4, p. 471–474, Jan 1990. [51](#), [62](#), [66](#), [84](#)
- BRUNO-ALFONSO, A.; LÓPEZ, F. E.; RAIGOZA, N.; REYES-GÓMEZ, E. Magnetic-field and confinement effects on the effective Landé g factor in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  parabolic quantum wells. **The European Physical Journal B**, Springer-Verlag, v. 74, n. 3, p. 319–329, 2010. [47](#)
- BYCHKOV, Y. A.; RASHBA, E. Oscillatory effects and magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, v. 17, p. 6039–6045, 1984. [11](#), [13](#), [18](#), [65](#)
- CHI, W. S.; HUANG, Y. S. The determination of the band offsets in strained-layer  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  quantum wells by low-temperature modulation spectroscopy. **Semiconductor Science and Technology**, v. 10, n. 2, p. 127, 1995. [56](#)
- COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **quantum mechanics**. Paris: Wiley-VHC, 1977. [21](#), [35](#), [36](#)

CUI, L.; ZENG, Y.; WANG, B.; ZHU, Z.; LIN, L.; JIANG, C.; GUO, S.; CHU, J. Zero-field spin splitting in  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  metamorphic high-electron-mobility-transistor structures on GaAs substrates using Shubnikov-de Haas measurements. **Applied Physics Letters**, v. 80, n. 17, p. 3132–3134, 2002. [78](#), [80](#), [81](#)

DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. **Applied Physics Letters**, v. 56, n. 7, p. 665–667, 1990. [17](#), [27](#), [59](#)

DAVIES, J. H. **The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1998. [18](#), [39](#), [40](#), [49](#), [67](#), [68](#), [71](#)

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. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 73, n. 8, p. 085316, Feb 2006. [47](#)

DRESSELHAUS, G. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. **Physical Review**, American Physical Society, v. 100, n. 2, p. 580–586, Oct 1955. [18](#), [73](#)

DYAKONOV, M. I.; PEREL, V. I. Spin relaxation of conduction electrons in noncentrosymmetric semiconductors. **Soviet physics, Solid state**, v. 13, p. 35813585, 1971. [18](#), [83](#)

EISBERG, R.; RESNICK, R. **Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei, and particles**. [S.l.]: Wiley, 1985. (Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles). [19](#)

ENGELS, G.; LANGE, J.; SCHÄPERS, T.; LÜTH, H. Experimental and theoretical approach to spin splitting in modulation-doped  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$  quantum wells for  $B \rightarrow 0$ . **Physical Review B**, American Physical Society, v. 55, n. 4, p. R1958–R1961, Jan 1997. [81](#)

EPPENGA, R.; SCHUURMANS, M. F. H. Effect of bulk inversion asymmetry on [001], [110], and [111] GaAs/AlAs quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 37, n. 18, p. 10923–10926, Jun 1988. [73](#), [74](#), [76](#)

FANG, F. F.; HOWARD, W. E. Negative field-effect mobility on (100) Si surfaces. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 16, n. 18, p. 797–799, May 1966. [67](#)

FERT, A. Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 80, p. 1517–1530, Dec 2008. [11](#), [13](#), [17](#), [83](#)



FROLOV, S. M.; LÜSCHER, S.; YU, W.; REN, Y.; FOLK, J. A.; WEGSCHEIDER, W. Ballistic spin resonance. **Nature**, v. 458, n. 7240, p. 868–871, 2009. [80](#), [81](#)

GANICHEV, S. D.; BEL'KOV, V. V.; GOLUB, L. E.; IVCHENKO, E. L.; SCHNEIDER, P.; GIGLBERGER, S.; EROMS, J.; BOECK, J. D.; BORGHS, G.; WEGSCHEIDER, W.; WEISS, D.; PRETTL, W. Experimental separation of Rashba and Dresselhaus spin splittings in semiconductor quantum wells. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 92, n. 25, p. 256601, Jun 2004. [79](#)

GERCHIKOV, L. G.; SUBASHIEV, A. V. Spin splitting of size-quantization subbands in asymmetric heterostructures. **Soviet physics: Semiconductors**, v. 26, n. 1, p. 73–78, 1992. [49](#), [51](#), [58](#), [84](#)

GERLACH, W.; STERN, O. Das magnetische Moment des Silberatoms. **Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei**, Springer Berlin / Heidelberg, v. 9, n. 1, p. 353–355, dez. 1922. [19](#)

GIGLBERGER, S.; GOLUB, L. E.; BEL'KOV, V. V.; DANILOV, S. N.; SCHUH, D.; GERL, C.; ROHLFING, F.; STAHL, J.; WEGSCHEIDER, W.; WEISS, D.; PRETTL, W.; GANICHEV, S. D. Rashba and Dresselhaus spin splittings in semiconductor quantum wells measured by spin photocurrents. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 75, n. 3, p. 035327, Jan 2007. [80](#), [81](#)

GILBERTSON, A. M.; BRANFORD, W. R.; FEARN, M.; BUCKLE, L.; BUCKLE, P. D.; ASHLEY, T.; COHEN, L. F. Zero-field spin splitting and spin-dependent broadening in high-mobility InSb/  $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$  asymmetric quantum well heterostructures. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 79, n. 23, p. 235333, Jun 2009. [80](#)

GRUNDLER, D. Large Rashba splitting in InAs quantum wells due to electron wave function penetration into the barrier layers. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 84, n. 26, p. 6074–6077, Jun 2000. [66](#), [80](#), [81](#)

HANNAK, R.; OESTREICH, M.; HEBERLE, A.; RÜHLE, W.; KÖHLER, K. Electron  $g$  factor in quantum wells determined by spin quantum beats. **Solid State Communications**, v. 93, n. 4, p. 313 – 317, 1995. [47](#)

HARRISON, P. **Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures**. [S.l.]: Wiley, 2005. [18](#)

III, T. P. S.; FANG, F. F.  $g$  factor of electrons in an InAs quantum well. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 35, n. 14, p. 7729–7731, May 1987. [47](#)

- IVCHENKO, E.; KISELEV, A.; WILLANDER, M. Electronic g factor in biased quantum wells. **Solid State Communications**, v. 102, n. 5, p. 375 – 378, 1997. [47](#)
- IVCHENKO, E. L.; KISELEV, A. A. Electron g factor of quantum wells and superlattices. **Soviet physics: Semiconductors**, American Institute of Physics, v. 26, n. 8, p. 827–831, Aug 1992. [47](#), [48](#)
- JANCU, J.-M.; SCHOLZ, R.; SILVA, E. A. de Andrada e; ROCCA, G. C. L. Atomistic spin-orbit coupling and  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  parameters in III-V semiconductors. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 72, n. 19, p. 193201, Nov 2005. [71](#), [76](#)
- JEUNE, P. L.; ROBART, D.; MARIE, X.; AMAND, T.; BROSSEAU, M.; BARRAU, J.; KALEVCIH, V. Anisotropy of the electron lande g factor in quantum wells. **Semiconductor Science and Technology**, IOP, v. 12, p. 380, 1997. [47](#), [55](#)
- KANE, E. **Handbook on Semiconductors**. [S.l.]: North-Holland Publishing Company, 1982. [11](#), [13](#), [37](#), [38](#), [39](#)
- KATO, Y.; MYERS, R.; GOSSARD, A.; AWSCHALOM, D. Observation of the spin Hall effect in semiconductors. **Science**, v. 306, n. 5703, p. 1910–1912, 2004. [17](#)
- KIKKAWA, J. M.; SMORCHKOVA, I. P.; SAMARTH, N.; AWSCHALOM, D. D. Room-temperature spin memory in two-dimensional electron gases. **Science**, v. 277, n. 5330, p. 1284–1287, 1997. [18](#)
- KIM, N.; ROCCA, G. C. L.; RODRIGUEZ, S. Effect of nonparabolicity on the conduction-electron spin resonance in cubic semiconductors. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 40, n. 5, p. 3001–3012, Aug 1989. [47](#), [51](#), [84](#)
- KISELEV, A. A.; IVCHENKO, E. L.; RÖSSLER, U. Electron g factor in one- and zero-dimensional semiconductor nanostructures. **Physical Review B**, v. 58, n. 24, p. 16353–16359, Dec 1998. [47](#)
- 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, 1999. [47](#)
- KLITZING, K. v.; DORDA, G.; PEPPER, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 45, n. 6, p. 494–497, Aug 1980. [17](#)
- KönIG, M.; WIEDMANN, S.; BRÜNE, C.; ROTH, A.; BUHMANN, H.; MOLENKAMP, L. W.; QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. **Science**, v. 318, n. 5851, p. 766–770, 2007. [17](#)

- KOHDA, M.; LECHNER, V.; KUNIHASHI, Y.; DOLLINGER, T.; OLBRICH, P.; SCHÖNHUBER, C.; CASPERS, I.; BEL'KOV, V. V.; GOLUB, L. E.; WEISS, D.; RICHTER, K.; NITTA, J.; GANICHEV, S. D. Gate-controlled persistent spin helix state in (In,Ga)As quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 86, n. 8, p. 081306, Aug 2012. [81](#)
- KOO, H. C.; KWON, J. H.; EOM, J.; CHANG, J.; HAN, S. H.; JOHNSON, M. Control of spin precession in a spin-injected field effect transistor. **Science**, v. 325, n. 5947, p. 1515–1518, 2009. [17](#)
- KORALEK, J. D.; WEBER, C. P.; ORENSTEIN, J.; BERNEVIG, B. A.; ZHANG, S.-C.; MACK, S.; AWSCHALOM, D. D. Emergence of the persistent spin helix in semiconductor quantum wells. **Nature**, v. 458, n. 7238, p. 610–613, 2009. [18](#), [83](#)
- 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. [58](#)
- KOTLYAR, R.; REINECKE, T. L.; BAYER, M.; FORCHEL, A. Zeeman spin splittings in semiconductor nanostructures. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 63, n. 8, p. 085310, Feb 2001. [47](#)
- LAMARI, S. Effective mass theory of the Rashba effect in heterostructures. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 75, n. 15, p. 155302, Apr 2007. [31](#)
- LASSNIG, R.  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  theory, effective-mass approach, and spin splitting for two-dimensional electrons in GaAs-GaAlAs heterostructures. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 31, n. 12, p. 8076–8086, Jun 1985. [62](#)
- LI, J.; CHANG, G. H. K.; CHAN, K. Anomalous Rashba spin-orbit interaction in InAs/GaSb quantum wells. **Applied Physics Letters**, v. 92, p. 152107–1–152107–3, 2008. [31](#)
- LUTTINGER, J. M.; KOHN, W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. **Physical Review**, American Physical Society, v. 97, n. 4, p. 869–883, Feb 1955. [11](#), [13](#), [49](#)
- MALINOWSKI, A.; HARLEY, R. T. Anisotropy of the electron  $g$  factor in lattice-matched and strained-layer III-V quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 62, n. 3, p. 2051–2056, Jul 2000. [47](#), [55](#), [56](#)
- MALVINO, A. **Electronic Principles**. [S.l.]: McGraw-Hill, 1993. (McGraw-Hill electrical engineering series). [17](#)

- MARQUES, G. E.; SHAM, L. J. Theory of space-charge layers in narrow-gap semiconductors. **Surface Science**, v. 113, p. 131–136, 1982. [49](#), [84](#)
- MATSUYAMA, T.; KÜRSTEN, R.; MEISSNER, C.; MERKT, U. Rashba spin splitting in inversion layers on p-type bulk InAs. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 61, n. 23, p. 15588–15591, Jun 2000. [79](#)
- PESKIN, M.; SCHROEDER, D. **An Introduction to Quantum Field Theory**. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company, 1995. (Advanced book classics). [24](#)
- PFEFFER, P.; ZAWADZKI, W. Anisotropy of spin  $g$  factor in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As symmetric quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 74, n. 23, p. 233303, Dec 2006. [47](#)
- ROTH, L. M.; LAX, B.; ZWERDLING, S. Theory of optical magneto-absorption effects in semiconductors. **Physical Review**, APS, v. 114, p. 90, 1959. [47](#), [51](#), [84](#)
- SANDOVAL, M. A. T.; SILVA, A. Ferreira da; SILVA, E. A. de Andrada e; ROCCA, G. C. L. Variational Rashba splitting in two-dimensional electron gases in III-V semiconductor heterojunctions. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 79, n. 24, p. 241305, Jun 2009. [11](#), [13](#), [67](#), [78](#)
- \_\_\_\_\_. Variational analysis of the Rashba splitting in III-V semiconductor inversion layers. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 83, n. 23, p. 235315, Jun 2011. [11](#), [13](#), [67](#)
- \_\_\_\_\_. Mesoscopic spin-orbit effect in the semiconductor nanostructure electron  $g$  factor. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 86, n. 19, p. 195302, Nov 2012. [11](#), [13](#)
- \_\_\_\_\_. Rashba and Dresselhaus spin-orbit interaction strength in GaAs/GaAlAs heterojunctions. **Physics Procedia**, v. 28, n. 0, p. 95 – 98, 2012. [81](#)
- \_\_\_\_\_. Spin-orbit interaction strength and anisotropy in III-V semiconductor heterojunctions. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 87, n. 8, p. 081304, Feb 2013. [11](#), [13](#), [75](#)
- SCHÄPERS, T.; ENGELS, G.; LANGE, J.; KLOCKE, T.; HOLLFELDER, M.; LÜTH, H. Effect of the heterointerface on the spin splitting in modulation doped In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/InP quantum wells for B→0. **Journal of Applied Physics**, v. 83, n. 8, p. 4324–4333, 1998. [81](#)

SCHIERHOLZ, C.; MATSUYAMA, T.; MERKT, U.; MEIER, G. Weak localization and spin splitting in inversion layers on *p*-type InAs. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 70, n. 23, p. 233311, Dec 2004. [79](#)

SCHLIEMANN, J.; EGUES, J. C.; LOSS, D. Nonballistic spin-field-effect transistor. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 90, n. 14, p. 146801, Apr 2003. [30](#)

SILVA, E. A. de Andrada e. Conduction-subband anisotropic spin splitting in III-V semiconductor heterojunctions. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 46, n. 3, p. 1921–1924, Jul 1992. [18](#), [62](#), [73](#)

SILVA, E. A. de Andrada e; ROCCA, G. C. L.; BASSANI, F. Spin-split subbands and magneto-oscillations in III-V asymmetric heterostructures. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 50, n. 12, p. 8523–8533, Sep 1994. [28](#), [30](#), [49](#), [51](#), [58](#), [62](#), [64](#), [66](#), [67](#), [72](#), [84](#)

\_\_\_\_\_. Spin-orbit splitting of electronic states in semiconductor asymmetric quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 55, n. 24, p. 16293–16299, Jun 1997. [51](#), [58](#), [63](#)

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<sub>1-x</sub>Mg<sub>x</sub>Te single quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 56, n. 4, p. 2114–2119, Jul 1997. [47](#)

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 GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 44, n. 20, p. 11345–11352, Nov 1991. [47](#)

SOLER, X. C. **Theoretical methods for spintronics in semiconductors with applications**. Tese (Doutorado) — California Institute of Technology, Pasadena, CA, may 2003. [31](#)

SOUSA, J. S. de; DETZ, H.; KLANG, P.; GORNIK, E.; STRASSER, G.; SMOLINER, J. Enhanced Rashba effect in transverse magnetic fields observed on InGaAs/GaAsSb resonant tunneling diodes at temperatures up to T=180 K. **Applied Physics Letters**, v. 99, n. 15, p. 152107, 2011. [48](#)

TOMIMOTO, S.; NOZAWA, S.; TERAJ, Y.; KURODA, S.; TAKITA, K.; MASUMOTO, Y. Anisotropic spin dynamics of confined electrons in CdTe/ZnTe

quantum structures. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 81, n. 12, p. 125313, Mar 2010. [47](#)

TOMONAGA, S. **The Story of Spin**. [S.l.]: University of Chicago Press, 1997. (A Pacific Basin Institute book). [26](#)

TSUI, D. C.; STORMER, H. L.; GOSSARD, A. C. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 48, n. 22, p. 1559–1562, May 1982. [17](#)

WANG, G.; LIU, B. L.; BALOCCHI, A.; RENUCCI, P.; ZHU, C. R.; AMAND, T.; FONTAINE, C.; MARIE, X. Gate control of the electron spin-diffusion length in semiconductor quantum wells. **Nature Communications**, Nature Publishing Group, v. 4, n. 2372, Sep 2013. [85](#)

WEISBUCH, C.; HERMANN, C. Optical detection of conduction-electron spin resonance in GaAs, Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As, and Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 15, p. 816–822, Jan 1977. [54](#)

WILAMOWSKI, Z.; JANTSCH, W.; MALISSA, H.; RÖSSLER, U. Evidence and evaluation of the Bychkov-Rashba effect in SiGe/Si/SiGe quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 66, n. 19, p. 195315, Nov 2002. [48](#)

WINKLER, R. **Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems**. [S.l.]: Springer, 2003. (Physics and Astronomy Online Library, N° 191). [31](#)

\_\_\_\_\_. Spin orientation and spin precession in inversion-asymmetric quasi-two-dimensional electron systems. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 69, n. 4, p. 045317, Jan 2004. [18](#), [73](#)

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. [17](#)

WUNDERLICH, J.; PARK, B.-G.; IRVINE, A. C.; ZÂRBO, L. P.; ROZKOTOVÁ, E.; NEMEC, P.; NOVÁK, V.; SINOVA, J.; JUNGWIRTH, T. Spin Hall effect transistor. **Science**, v. 330, n. 6012, p. 1801–1804, 2010. [17](#)

YANG, C. L.; HE, H. T.; DING, L.; CUI, L. J.; ZENG, Y. P.; WANG, J. N.; GE, W. K. Spectral dependence of spin photocurrent and current-induced spin polarization in an InGaAs/InAlAs two-dimensional electron gas. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 96, n. 18, p. 186605, May 2006. [78](#), [80](#), [81](#)

YANG, W.; CHANG, K. Rashba spin splitting in biased semiconductor quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 73, n. 11, p. 113303, Mar 2006. [31](#)

YU, P.; CARDONA, M. **Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties**. [S.l.]: Springer, 1996. [38](#), [39](#)

ZHANG, X. C.; ORTNER, K.; PFEUFFER-JESCHKE, A.; BECKER, C. R.; LANDWEHR, G. Effective  $g$  factor of  $n$ -type HgTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te single quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 69, n. 11, p. 115340, Mar 2004. [47](#), [48](#)

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. [47](#)

ZUTIC, I.; FABIAN, J.; SARMA, S. D. Spintronics: Fundamentals and applications. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 76, p. 323–410, Apr 2004. [17](#), [47](#)





## A - ANEXO: MANUSCRITOS E PUBLICAÇÕES

1. *A theory for the electron g-factor renormalization in semiconductor quantum wells*, M. A. Toloza Sandoval; A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva; G. C. La Rocca, manuscrito em preparação.
2. *Mesoscopic spin-orbit effect in the semiconductor nanostructure electron g factor*, M. A. Toloza Sandoval; A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva; G. C. La Rocca, *Physical Review. B*, v. 86, p. 195302, 2012.
3. *Variational Rashba splitting in two-dimensional electron gases in III-V semiconductor heterojunctions*, M. A. Toloza Sandoval; A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva; G. C. La Rocca, *Physical Review. B*, v. 79, p. 241305(R), 2009.
4. *Variational analysis of the Rashba splitting in III-V semiconductor inversion layers*, M. A. Toloza Sandoval; A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva; G. C. La Rocca, *Physical Review. B*, v. 83, p. 235315, 2011.
5. *Spin-orbit interaction strength and anisotropy in III-V semiconductor heterojunctions*, M. A. Toloza Sandoval; A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva; G. C. La Rocca, *Physical Review. B*, v. 87, p. 081304(R), 2013.
6. *Spin-orbit splitting anisotropy in n type InGaAs inversion layers*, M. A. Toloza Sandoval; A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva; G. C. La Rocca, *AIP Conference Proceedings*, v. 1416, p. 91-94, 2011.
7. *Rashba and Dresselhaus spin-orbit interaction strength in GaAs/GaAlAs heterojunctions*, M. A. Toloza Sandoval; A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva; G. C. La Rocca, *Physics Procedia*, v. 28, p. 95-98, 2012.
8. *Effective electron g-factor in asymmetric quantum wells*, M. A. Toloza Sandoval; A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva; G. C. La Rocca, *Physics Procedia*, 2014, to be published.

# A theory for the electron g-factor renormalization in semiconductor quantum wells

M. A. Toloza Sandoval<sup>1</sup>, A. Ferreira da Silva<sup>1</sup>, E. A. de Andrada e Silva<sup>2</sup> and G. C. La Rocca<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia 40210-340, Salvador, Bahia, Brazil*

<sup>2</sup> *Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, C.P. 515, 12201-970 São José dos Campos, São Paulo, Brazil and*

<sup>3</sup> *Scuola Normale Superiore and CNISM, Piazza dei Cavalieri 7, I-56126 Pisa, Italy*

A theory for the renormalization of the electron g-factor due to the mesoscopic confining potential in semiconductor quantum wells (QWs) is presented, using standard envelope-function approximation and Kane's model for the bulk. It provides a simple physical picture for the QW g-factor anisotropy to general asymmetric QWs, which shows that in these structures, the spin-orbit origin of both Rashba and effective Zeeman effects is indeed the same. Analytical solutions are obtained for typical QWs in the flat-band approximation, that helps further clarify such close connection between the effective g-factor and the interplay Rashba-Zeeman.

The electron g-factor is a fundamental physical quantity which determines the spin splitting energy of the electronic states in response to an external magnetic field. For an electron in the vacuum, the value of the g-factor can be predicted with extreme precision, i.e.,

$$g_e = 2 \times 1.001\,159\,657(4), \quad (1)$$

where the slight deviation around the value 2 is due to the radiative corrections [1]. Nevertheless, in condensed matter physics, the electron g-factor is strongly renormalized from the bare value  $g_e$  by the interactions; for example, in semiconductors, the g-factor is renormalized by band structure effects, and is referred to as the effective g-factor ( $g^*$ ), in analogy with the effective mass ( $m^*$ ). Among the III-V semiconductors the electron  $g^*$  varies, for example, from  $\sim -0.5$  in GaAs to  $\sim -50$  in InSb and such variation can be well explained [2].

In semiconductor nanostructures,  $g^*$  is further renormalized by the confining mesoscopic potential and can therefore be tuned. Recently, a simple theory for the effective electron g-factor in III-V semiconductor quantum wells (QWs) was reported in good agreement with independent experimental results [3]. The confinement effects in the effective g-factor (i.e. from the interfaces) were shown to be similar and derived from the same spin-orbit (SO) term as the Rashba effect. However, in our previous work, only the simpler case of symmetric square QWs

was considered.

Here, we propose a theory for the renormalization of the electron g-factor due to the mesoscopic confining potential in a semiconductor quantum well (QW) with a general band profile. Analytical solutions are obtained for typical QWs in the flat-band approximation that helps further clarify such connection between the effective g-factor and the Rashba-Zeeman interference effect. Our theory extends over important situations, it is easy to check that our results reduces exactly to well-known limits; the zero magnetic field limit restore the axial symmetry with the usual Rashba effect, no SO interaction correspond to the Landau level quantization and, finally, the bulk limit in which the Roth theory for the electron g-factor is recovered. Our theory generalizes these models with an accurate multiband description of the bulk bands around the semiconductor fundamental gap, without requiring elaborate numerical calculations.

Firstly, we consider a semiconductor QW (with a general band profile) in the presence of an in-plane magnetic field along the  $y$  axis, i.e.,  $\mathbf{B} = (0, B, 0)$ . Using the Landau gauge with the vector potential  $\mathbf{A} = (zB, 0, 0)$ , within the  $8 \times 8 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Kane model, we add the bare Zeeman interaction making the fundamental substitution  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}$  ( $-e$  being the electron charge). Finally, following the reference [3], in an envelope function approach, we perform the projection into the conduction band and obtain the effective Hamiltonian for electrons given by,

$$H_{eff;\sigma}^{CB} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon_\sigma)} \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2 (k_x + z/l^2)^2}{2m(z, \varepsilon_\sigma)} + E_c(z) + v(z) - \frac{1}{2} \frac{4m_e}{\hbar^2} \left[ \alpha_R(z, \varepsilon_\sigma) (z - z_0) + \eta(z, \varepsilon_\sigma) \right] \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}, \quad (2)$$

where  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \pm B$  (i.e.,  $\sigma = \pm$  correspond to spin up and down along the spin quantization direction and  $\varepsilon_\sigma$  give the spin-split energies we are looking for). Note that, from the semi-classical point of view, the quantum number  $k_x$  define the center of the electronic orbit in their

cyclotron motion, i.e.,  $z_0 = -l^2 k_x$ , where  $l = \sqrt{\hbar/eB}$  is the magnetic length. The Bohr magneton is given by  $\mu_B = e\hbar/2m_e$  and  $m_e$  is the free-electron mass. Remembering that  $\alpha_R(z, \varepsilon_\sigma) = \frac{d}{dz} \eta(z, \varepsilon_\sigma)$  and that the effective mass  $m(z, \varepsilon_\sigma)$  and SO parameter  $\eta(z, \varepsilon_\sigma)$  are described

by simple expressions in terms of the bulk parameters,

$$\frac{1}{m(z, \varepsilon_\sigma)} = \frac{P^2}{\hbar^2} \left[ \frac{2}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z)} + \frac{1}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z) + \Delta(z)} \right] \quad (3)$$

and

$$\eta(z, \varepsilon_\sigma) = \frac{P^2}{2} \left[ \frac{1}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z)} - \frac{1}{\varepsilon_\sigma - v(z) - E_v(z) + \Delta(z)} \right]. \quad (4)$$

where  $z$  is the growth direction,  $v(z)$  is the electrostatic potential energy and  $E_c$ ,  $E_v$  and  $\Delta$  stand for, respectively, the conduction band edge, the valence band edge and the valence band spin-orbit splitting.  $P$  is the usual interband momentum matrix element, which is assumed to be constant and is calculated with the measured conduction band effective mass in the well material.

The in-plane  $g_{QW}^*$  can then be obtained in first-order perturbation theory. Considering that the unperturbed problem,

$$H_0(B=0)\langle z|f^{(0)}\rangle = \varepsilon_0\langle z|f^{(0)}\rangle, \quad (5)$$

corresponds to the Kane QW problem (note that for  $B=0$ ,  $f_{k_x}^{(0)} = f^{(0)}$ , i.e., does not depend on the center of the orbit; and that we consider the bottom of the subband corresponding to  $k_x=0$ ) with

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon)} \frac{d}{dz} + E_c(z) + v(z). \quad (6)$$

Using the unperturbed eigenstates  $\{|f^{(0)}\rangle\}$ , a hierarchy of approximations to  $g_{QW}^*$  can be obtained,

$$g_{QW}^* = g_e - \langle f^{(0)}|g_{bulk}(z, \varepsilon_0)f^{(0)}\rangle - \frac{4m_e}{\hbar^2} \langle f^{(0)}|\alpha_R(z, \varepsilon_0)(z - z_0)|f^{(0)}\rangle \quad (7)$$

with

$$g_{bulk}(z, \varepsilon_0) = \frac{4m_e}{\hbar^2} \eta(z, \varepsilon_0) + \delta g_{rem}, \quad (8)$$

where  $\delta g_{rem}$  represents the correction due to all the remote bands not included in the Kane model; assuming that the Kane model gives a perfect description of the 8 bands it does include,  $\delta g_{rem}$  is then given by the difference between the g-factor measured experimentally in the bulk and that given by the Roth formula [2]. By rotating the magnetic-field to align it with the growth direction, one restores the QW axial symmetry and the g-factor interface SO term goes to zero. One then obtain the perpendicular effective g-factor simply

given by  $g_\perp^* = g_e - \langle f^{(0)}|g_{bulk}(z, \varepsilon_0)|f^{(0)}\rangle$  and, therefore, the correspondent anisotropy can be defined, i.e.,  $\Delta g_{QW} = |g_{QW}^* - g_\perp^*|$ , with

$$\Delta g_{QW} = \frac{4m_e}{\hbar^2} \langle f^{(0)}|\alpha_R(z, \varepsilon_0)(z - z_0)|f^{(0)}\rangle. \quad (9)$$

**Examples** - As illustrate in Figure 1, we consider asymmetric QWs with different right and left barriers, as, for example, in *GaAs/GaAlAs* QWs with different Al concentrations in each side of the well (i.e.  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$  QWs with  $x \neq y$ ).

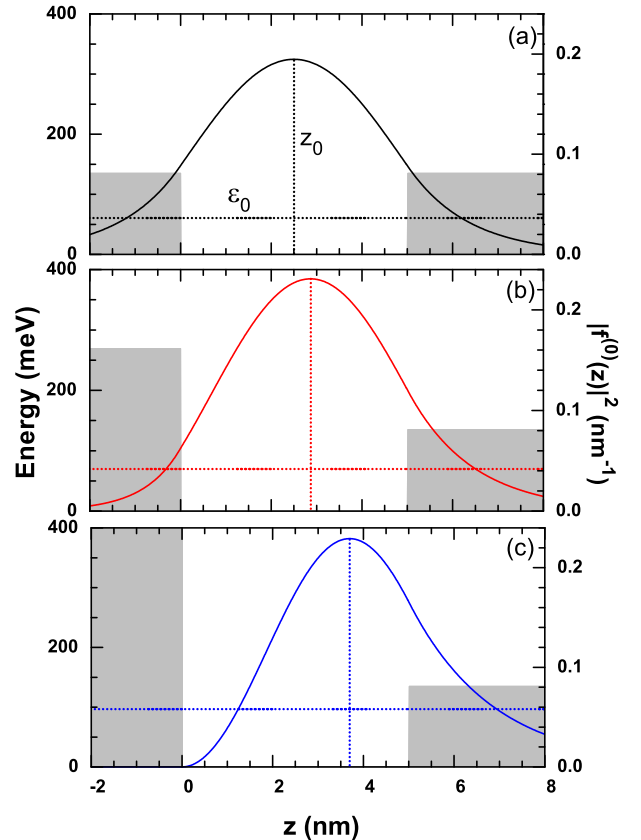


FIG. 1. Conduction profile for typical flat-band semiconductor QWs (a)  $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$  (black lines), (b)  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$  (red lines) and (c) *insulator/GaAs/Al\_{0.15}Ga\_{0.85}As* (blue lines). The density of probability, the low state energy and the center of the cyclotron orbit also are shown. The bulk parameters used are  $E_g = (1.519 + 1.247x)\text{eV}$ ,  $\Delta = (1.859 + 1.115x + 0.37x^2 - E_g)\text{eV}$  and  $g^* = -0.44 + 4.25x - 3.9x^2$ . For the conduction band-offset we used the 72% rule.

Considering the interfaces localized in  $z_1$  e  $z_2$ ,

$$g_{QW}^* = g_e - \bar{g}_{bulk}^* + \frac{4m_e}{\hbar^2} \left[ \delta\eta_1(z_0 - z_1)|f^{(0)}(z_1)|^2 + \delta\eta_2(z_2 - z_0)|f^{(0)}(z_2)|^2 \right] \quad (10)$$

where  $\delta\eta_1 = \eta_w - \eta_l$ ,  $\delta\eta_2 = \eta_w - \eta_r$ ,  $\bar{g}_{bulk}^* = g_l^*(\varepsilon_0)P_l + g_w^*(\varepsilon_0)P_w + g_r^*(\varepsilon_0)P_r$  ( $P_i = \int_i |f^{(0)}(z)|^2 dz$ ) with  $l \leq z_1$ ,

$r \geq z_2$  and  $z_1 < z_0 < z_2$ . The corresponding anisotropy is given by

$$\Delta g_{QW} = \frac{4m_e}{\hbar^2} \left[ \delta\eta_1(z_0 - z_1)|f^{(0)}(z_1)|^2 + \delta\eta_2(z_2 - z_0)|f^{(0)}(z_2)|^2 \right]. \quad (11)$$

In the infinite-barrier limit (Fig. 1 (c)), the anisotropy reduces to  $\Delta g_{QW} = \frac{4m_e}{\hbar^2} \delta\eta_2(z_2 - z_0)|f^{(0)}(z_2)|^2$ . Another example is the symmetric quantum well (Fig. 1 (a)), where the effective g factor the contributions of the two interfaces have the same sign and are added together, i.e.,

$$\Delta g_{QW} = \frac{4m_e}{\hbar^2} \delta\eta_1(z_2 - z_1)|f^{(0)}(z_1)|^2. \quad (12)$$

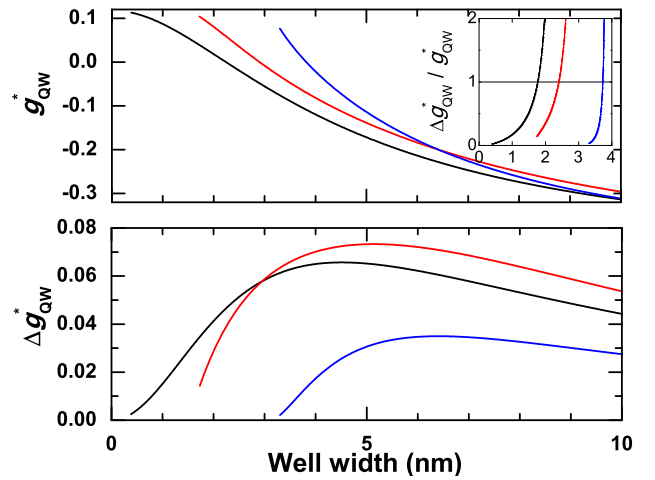


FIG. 2. The upper panel shows the effective electron g-factor and the lower panel shows the corresponding giromagnetic anisotropy for the same semiconductor quantum wells considered in Fig. 1, i.e.,  $Al_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$  (black lines),  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$  (red lines) e  $insulator/GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$  (blue lines).

- 
- [1] J. Schwinger, Phys. Rev. **73**, 416 (1948).  
 [2] L. M. Roth, B. Lax, and S. Zwerdling, Physical Review **114**, 90 (1959).  
 [3] G. Brozak, E. de Andrada e Silva, L. Sham, F. DeRosa,

P. Miceli, S. Schwarz, J. Harbison, L. Florez, and J. S.J. Allen, Phys. Rev. Lett. **64**, 471 (1990).

**Mesoscopic spin-orbit effect in the semiconductor nanostructure electron  $g$  factor**M. A. Toloza Sandoval,<sup>1</sup> A. Ferreira da Silva,<sup>1</sup> E. A. de Andrada e Silva,<sup>2</sup> and G. C. La Rocca<sup>3</sup><sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia 40210-340, Salvador, Bahia, Brazil*<sup>2</sup>*Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, C.P. 515, 12201-970 São José dos Campos, São Paulo, Brazil*<sup>3</sup>*Scuola Normale Superiore and CNISM, Piazza dei Cavalieri 7, I-56126 Pisa, Italy*

(Received 16 March 2012; published 5 November 2012)

The renormalization of the electron  $g$  factor by the confining potential in semiconductor nanostructures is considered. A new effective  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Hamiltonian for the electronic states in III–V semiconductor nanostructures in the presence of an external magnetic field is introduced. The mesoscopic spin-orbit (Rashba type) and Zeeman interactions are taken into account on an equal footing. It is then solved analytically for the electron effective  $g$  factor in symmetric quantum wells ( $g_{\text{QW}}^*$ ). Comparison with different spin quantum beat measurements in GaAs and InGaAs structures demonstrates the accuracy and utility of the theory. The quantum size effects in  $g_{\text{QW}}^*$  are easily understood and its anisotropy  $\Delta g_{\text{QW}}^*$  (i.e., the difference between the in-plane and perpendicular configurations) is shown to be given by a mesoscopic spin-orbit effect having the same origin as the Rashba one.

DOI: 10.1103/PhysRevB.86.195302

PACS number(s): 73.21.Fg, 78.67.—n

**I. INTRODUCTION**

The Landé  $g$  factor is a fundamental physical quantity that determines the spin splitting of the electronic states in response to an external magnetic field, known as Zeeman effect. For charge and spin carriers in semiconductors, the  $g$  factor is renormalized from the bare value 2 by band structure effects and is referred to as the effective  $g$  factor ( $g^*$ ), in analogy with the effective mass ( $m^*$ ). In semiconductor nanostructures  $g^*$  is further renormalized by the confining mesoscopic potential and can therefore be tuned. However, despite its great scientific and technological interest, such effect is still not well understood and, here, a simple solution is presented.

Among the III–V semiconductors, the electron  $g^*$  varies, for example, from  $\sim -0.5$  in GaAs to  $\sim -50$  in InSb. Such variation is well explained by the celebrated Roth  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  formula

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

( $m^*/m_e$  being the electron effective mass in units of the free-electron mass,  $\Delta$  the valence-band SO splitting, and  $E_g$  the fundamental energy gap). This expression was derived by Roth, Lax, and Zwerdling<sup>1</sup> with second-order perturbation theory, including only the interaction with the valence-band, and corresponds to the exact Kane model solution at the conduction band edge.<sup>2</sup>

More recently, in semiconductor spintronics, there is great interest in the electron  $g$ -factor control or tuning for spin manipulation, which can be achieved with quantum confinement effects in nanostructures. The electron effective  $g$  factor in III–V QWs ( $g_{\text{QW}}^*$ ) has been then much investigated both experimentally<sup>3–11</sup> and theoretically,<sup>12–19</sup> and the overall  $g_{\text{QW}}^*$  variation with the QW width  $L$  is well established. However, for example, the well-width dependence of the basic anisotropy  $\Delta g_{\text{QW}}^*$  (the difference between in-plane and perpendicular  $g_{\text{QW}}^*$ ; see Fig. 1) is still not well understood.

Experimentally,  $g_{\text{QW}}^*$  has been studied with the coincidence method in tilted magnetic fields,<sup>3,10</sup> with spin flip Raman scattering,<sup>7</sup> and with spin quantum beats,<sup>5,8,9</sup> which allowed detailed measurements of  $\Delta g_{\text{QW}}^*$  as a function of  $L$ . Such anisotropy was predicted by Ivchenko and Kiselev<sup>12</sup> with an

envelope-function theory based on the Kane model. The theory has been used to study the electron  $g^*$  in QWs of GaAs,<sup>5,8,9,12</sup> strained InGaAs,<sup>9</sup> CdTe,<sup>7,11,15</sup> GaN,<sup>15</sup> and with bias,<sup>13</sup> and has also been extended to quantum wires and dots.<sup>14</sup> However, its numerical results do not fit very well the quantum beat data for  $\Delta g_{\text{QW}}^*$  in GaAs<sup>8,9</sup> and InGaAs<sup>9</sup> QWs. The physical picture for the anisotropy is also not very transparent; it is ascribed to the difference between the light and heavy hole effective masses, which are not well described by the Kane model. Most importantly, it is also still not clear what is the relation between  $g_{\text{QW}}^*$  and the Rashba SO coupling, for which different indications exist.<sup>10,20,21</sup> Finally, despite representing the most natural QW extension of the analytical bulk result in Eq. (1),<sup>22</sup> the use of the theory in Ref. 12 requires instead nontrivial numerical calculations.

Here we present an alternative solution for  $g_{\text{QW}}^*$  with none of these problems. A simple and accurate expression is derived that shows that the anisotropy  $\Delta g_{\text{QW}}^*$  is given by a mesoscopic SO term as the Rashba one. Based on standard envelope function theory,<sup>23,24</sup> we first derive an effective Hamiltonian for a single electron in an undoped QW in the presence of an external magnetic field, where the Rashba and the effective Zeeman couplings appear on an equal footing. Then with first-order perturbation theory we obtain our expressions for  $g_{\text{QW}}^*(L)$  and  $\Delta g_{\text{QW}}^*(L)$ .

**II. EFFECTIVE HAMILTONIAN**

We first consider the magnetic field in the QW plane, along  $y$ , i.e.,  $\vec{B} = (0, B, 0)$ , and use the Landau gauge with  $\vec{A} = (zB, 0, 0)$ . Then in the  $8 \times 8 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Hamiltonian we set  $k_y = 0$  (i.e., consider the bottom of the subband), add the bare Zeeman interaction, make the fundamental substitution  $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \frac{e}{\hbar} \vec{A}$  ( $-e$  being the electron charge), and following Ref. 24, perform the projection into the conduction band. Finally, by writing the conduction band envelope function as  $F = f_{k_x}(z)e^{ik_x x}$ ,<sup>25</sup> we obtain

$$H_{\text{eff}} = H_0 + H_R + H_Z,$$

i.e., an effective Hamiltonian for electrons in a QW with in-plane magnetic field given by the sum of three terms: a spin-

independent term,

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z, \varepsilon)} \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2 (k_x + z/l^2)^2}{2m^*(z, \varepsilon)} + E_c(z), \quad (2)$$

$l = \sqrt{\hbar/eB}$  being the magnetic length; a Rashba SO coupling term,

$$H_R = -\sigma_y k_x \frac{d}{dz} \beta(z, \varepsilon), \quad (3)$$

$\frac{\hbar}{2} \sigma_y$  being the  $y$  component of the spin operator; and an effective Zeeman term,

$$H_Z = \frac{1}{2} \left[ g_{\text{bulk}}^*(z, \varepsilon) - \frac{4m_e}{\hbar^2} z \frac{d}{dz} \beta(z, \varepsilon) \right] \mu_0 \sigma_y B, \quad (4)$$

$\mu_0 = e\hbar/2m_e$  being the Bohr magneton and

$$g_{\text{bulk}}^*(z, \varepsilon) = 2 - \frac{4m_e}{\hbar^2} \beta(z, \varepsilon) + \delta g_{\text{rem}}. \quad (5)$$

In the above equation,  $\delta g_{\text{rem}}$  represents the correction due to all the remote bands not included in the Kane model.<sup>26</sup> The effective mass and the SO  $\beta$  parameter are given by

$$\frac{1}{m^*(z, \varepsilon)} = \frac{P^2}{\hbar^2} \left[ \frac{2}{\varepsilon - E_v(z)} + \frac{1}{\varepsilon - E_v(z) + \Delta(z)} \right], \quad (6)$$

and

$$\beta(z, \varepsilon) = \frac{P^2}{2} \left[ \frac{1}{\varepsilon - E_v(z)} - \frac{1}{\varepsilon - E_v(z) + \Delta(z)} \right]; \quad (7)$$

$P$  being the momentum matrix element. Note that by measuring the electron energy from the bottom of conduction band of the well material, one has  $E_c = 0$  in the well and  $E_c = v_0 (= Q_c \Delta E_g, Q_c$  being the conduction band offset) in the barrier; while  $E_v = -E_g^w$  and  $-E_g^b + v_0$  in the well and in the barrier, respectively.

First, it is easy to check that the above obtained  $H_{\text{eff}}$  reduces exactly to well-known effective Hamiltonians in three important limits: (1) zero magnetic field<sup>24,27</sup>—the Kane QW effective Hamiltonian, with Rashba SO coupling, is recovered, note that for  $B = 0$  the quantum number  $k_x$ , which gives the center of the cyclotron orbit  $z_0 = -l^2 k_x$ , turns into the usual in-plane (or parallel) electron wave-vector, and the usual Rashba term is recovered. (2) No SO interaction ( $\Delta = 0$ )<sup>25</sup>— $H_{\text{eff}}$  for the in-plane QW Landau levels is recovered; and (3) the bulk limit<sup>2</sup>—the Kane nonparabolic bulk conduction band  $H_{\text{eff}}$  with the effective Zeeman interaction is recovered. Our  $H_{\text{eff}}$  generalizes then these models and allows the study of the interplay between the Rashba and Zeeman effects in QWs, with an accurate multiband description of the bulk bands around the semiconductor fundamental gap, without requiring elaborate numerical calculations.

### III. QW $g$ FACTOR

The Zeeman term [Eq. (4)] is seen to be made of a bulk plus an interface contribution.<sup>28</sup> Despite the same coupling parameter  $\alpha_R = \frac{d}{dz} \beta$ ,<sup>24</sup> this  $g$ -factor interface contribution has, however, different behavior than  $H_R$ . For example, while there is Rashba spin splitting only in asymmetric QWs (in symmetric QWs the contributions of the two interfaces cancel out), in the effective  $g$  factor the contributions of the two interfaces have

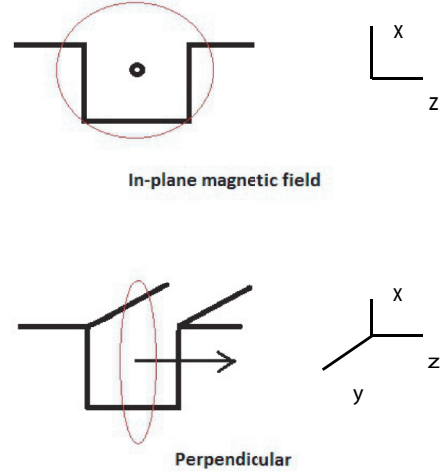


FIG. 1. (Color online) Illustration of the in-plane and perpendicular magnetic field configurations in a QW with growth direction along  $z$ . The arrow indicates the direction of the field and is seen from the top in the upper panel. The corresponding *classical* (real space) cyclotron orbit is also sketched, illustrating the fact that an in-plane magnetic field drives the electrons across the QW interfaces contrary to the perpendicular configuration.

the same sign and are added together in both symmetric and asymmetric QWs. Since  $H_Z$  is already explicitly linear with  $B$ , the in-plane  $g_{\text{QW}}^*$  can then be obtained with the coefficient calculated at  $B = 0$ . In first-order perturbation theory it means:

$$g_{\text{QW}}^* = \langle f^{(0)} | g_{\text{bulk}}^*(z, \varepsilon_0) - \frac{4m_e}{\hbar^2} z \frac{d}{dz} \beta(z, \varepsilon_0) | f^{(0)} \rangle, \quad (8)$$

where the unperturbed problem  $H_0(B = 0)f^{(0)} = \varepsilon_0 f^{(0)}$  corresponds to the Kane QW problem.<sup>29</sup>

Considering now a symmetric QW with interfaces at  $z = \pm L/2$  and recalling that  $\beta$  is a step function in  $z$  at the interfaces (where it changes from  $\beta_w$  to  $\beta_b$ ), one finds

$$g_{\text{QW}}^* = \bar{g}_{\text{bulk}}^* + \frac{4m_e}{\hbar^2} \delta\beta L |f^{(0)}(L/2)|^2, \quad (9)$$

where  $\delta\beta = \beta_w - \beta_b$  and  $\bar{g}_{\text{bulk}}^* = g_w^* P_w + g_b^* P_b$  is the QW averaged bulk  $g$  factor,  $P_i (= \int_i |f^{(0)}(z)|^2 dz)$  being the probability to find the electron in the region  $i = \text{barrier or well}$ , and we have used  $|f^{(0)}(L/2)|^2 = |f^{(0)}(-L/2)|^2$ . So we get a  $g_{\text{QW}}^*$ , which is given by the averaged bulk  $g^*$  plus an interface mesoscopic SO contribution, which goes to zero both for  $L = 0$  and for  $L$  going to infinity. In these limits, Eq. (1) is recovered (except for  $\delta g_{\text{rem}}$ ).

By rotating the magnetic-field to align it with the growth direction (i.e.,  $\vec{B} = B\hat{z}$ ), one restores the QW axial symmetry and the  $g$ -factor interface SO term goes to zero (similarly to the Rashba coupling when the parallel wave-vector goes to zero). One then obtains the perpendicular  $g_{\text{QW}}^*$  simply given by  $\bar{g}_{\text{bulk}}^*$ , and the anisotropy  $\Delta g_{\text{QW}}^* = \frac{4m_e}{\hbar^2} \delta\beta L |f^{(0)}(L/2)|^2$ , i.e., equal to the obtained  $g$ -factor interface SO contribution. This result provides a simple physical interpretation for the  $g_{\text{QW}}^*$  anisotropy. From the sketch in Fig. 1, it is indeed intuitively clear that only for in-plane fields the cyclotron orbit drives the electrons across the interfaces, so to feel the mesoscopic SO coupling there.

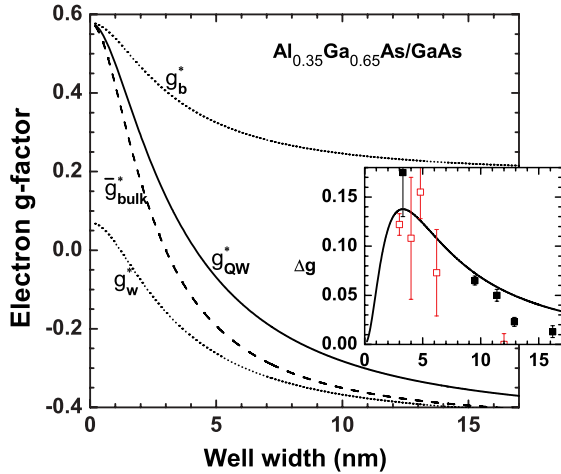


FIG. 2. (Color online) Calculated effective electron  $g$  factor as a function of the GaAs quantum well width. The inset compares the obtained anisotropy with the measurements in Refs. 8 (empty red symbols) and 9 (filled black symbols). The parameters being  $m_w^* = 0.067 m_e$ ,  $E_g^w = 1.52$  eV,  $\Delta^w = 0.34$  eV,  $\delta g_{\text{rem}}^w = -0.50$ ,  $E_g^b = 1.94$  eV,  $\Delta^b = 0.32$  eV,  $\delta g_{\text{rem}}^b = 0.13$ , and  $v_0 = 0.277$  eV.

#### IV. EXAMPLES

As specific examples, we consider now the  $g$  factor in GaAs and InGaAs QWs and compare with quantum beat measurements. All one has to do is to calculate  $\varepsilon_0$  and  $f^{(0)}(z)$  as a function of  $L$  (see Appendix) and substitute them in Eqs. (5) and (9). Figures 2 and 3 show the results obtained for the electron  $g$  factor in lattice matched AlGaAs/GaAs and InP/InGaAs QWs.<sup>30</sup> Besides the in-plane  $g_{\text{QW}}^*(L)$  [Eq. (9)], we plot also  $g_w^*(\varepsilon_0)$ ,  $\bar{g}_{\text{bulk}}^*$ , and  $g_b^*(\varepsilon_0)$ . For  $L = 0$ , as expected,  $g_{\text{QW}}^* = \bar{g}_{\text{bulk}}^* = g_b^*(v_0) = g_b^*$ , while for large values of  $L$ , both  $g_{\text{QW}}^*$  and  $\bar{g}_{\text{bulk}}^*$  slowly tend to  $g_w^*$ . The anisotropy in the smaller gap InGaAs QW is larger due to the stronger SO coupling and leads to a corresponding larger range of well-widths in which

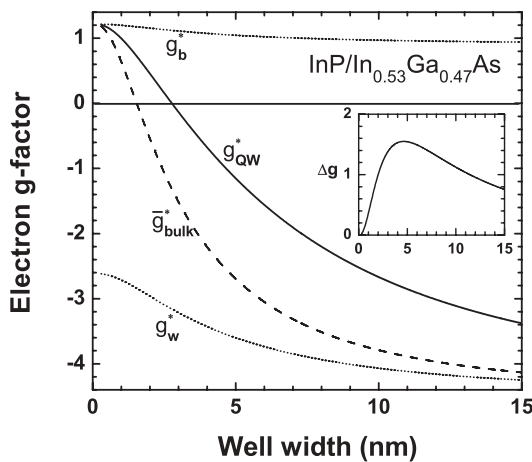


FIG. 3. As described in the legend of Fig. 2, obtained  $g_{\text{QW}}^*$  for lattice-matched InGaAs QWs. The parameters used are  $m_w^* = 0.041 m_e$ ,  $E_g^w = 0.813$  eV,  $\Delta^w = 0.326$  eV,  $\delta g_{\text{rem}}^w = -1.36$ ,  $E_g^b = 1.424$  eV,  $\Delta^b = 0.108$  eV,  $\delta g_{\text{rem}}^b = 0.24$ , and  $v_0 = 0.244$ .

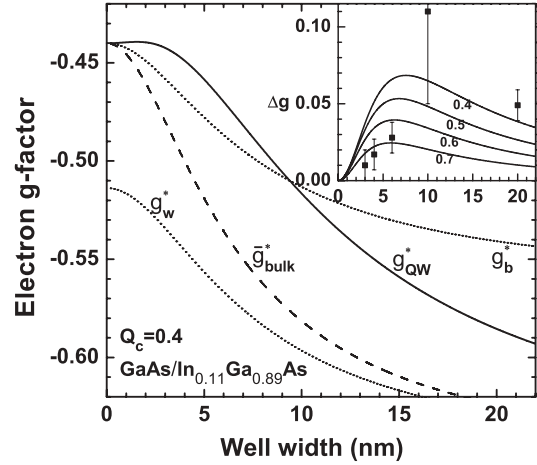


FIG. 4. Obtained effective electron  $g$  factor for strained InGaAs QWs as a function of the well width. The inset shows the calculated  $g$ -factor anisotropy for varying conduction band-offset  $Q_c$  together with the experimental results of Ref. 9. The parameters used are  $m_w^* = 0.062 m_e$ ,  $E_g^w = 1.394$  eV,  $\Delta^w = 0.333$  eV,  $\delta g_{\text{rem}}^w = -0.43$  for the InGaAs well and  $E_g^b = 1.53$  eV,  $\Delta^b = 0.34$  eV,  $\delta g_{\text{rem}}^b = -0.50$  for the GaAs barrier.

the in-plane ( $g_{\text{QW}}^*$ ) and perpendicular ( $\bar{g}_{\text{bulk}}^*$ ) QW effective  $g$  factors have opposite signs.

It is interesting to note the following hierarchy of approximations to  $g_{\text{QW}}^*$ : first,  $g_w^*[\varepsilon_0(L)]$ , which considers and gives only the nonparabolicity correction to  $g_w^*$ ,<sup>2</sup> due to the QW zero-point energy; then,  $\bar{g}_{\text{bulk}}^*$ , which includes the barrier penetration effects and gives the perpendicular  $g_{\text{QW}}^*$  (including nonparabolicity corrections also in  $g_b^*$ ), and finally, the in-plane  $g_{\text{QW}}^*$ , which includes also the SO interface contribution.

Another interesting example is the strained GaAs/InGaAs QWs. First, because for small In concentrations,  $g_w^*$  and  $g_b^*$  are similar and the interface contribution becomes then particularly important; and second, because  $\Delta g_{\text{QW}}^*$  in these QWs has been measured.<sup>9</sup> Figure 4 shows that in these QWs the SO interface contribution plays indeed an important role, to the point that for  $L \leq 10$  nm,  $g_{\text{QW}}^* \geq g_b^*$  and presents a soft maximum near  $L = 3$  nm. In the inset, the results for the anisotropy calculated with different conduction-band offsets (i.e.,  $Q_c = 0.4, 0.5, 0.6$ , and  $0.7$ ) are compared with the experimental data. Considering also the uncertainties (not shown) in the sample In content and well width, the inset becomes an indication that the band offset in these QWs is closer to 0.4 than to 0.7, in accord to the last entries in this dispute.<sup>31</sup>

#### V. CONCLUSIONS

We have presented an envelope-function theory for the renormalization of the electron  $g$  factor by the confining mesoscopic potential in semiconductor nanostructures. The obtained results, in particular regarding the solution for the problem of the electron  $g$  factor in semiconductor QWs, give us enough ground to believe that the theory can be very useful in the nanostructure electron  $g$  factor tuning effort. It provides a simple analytical expression for  $g_{\text{QW}}^*(L)$  [Eq. (9)], which applies to general III-V QWs and also an intuitive physical picture for the mesoscopic spin-orbit effect in these structures.

For instance, the well-known QW  $g$ -factor anisotropy is shown to be due to such mesoscopic spin-orbit (Rashba type) effect and is then simply explained.

A new effective Hamiltonian has been introduced for the calculation of the nanostructure electronic states in the presence of an external magnetic field; which can be used in the study of the electron  $g$  factor and of the interplay between Rashba and Zeeman interactions in asymmetric QWs, double-barrier structures, and superlattices as well. The mesoscopic spin-orbit (Rashba) and Zeeman effects are taken into account on an equal footing; and the good agreement with independent spin quantum beat measurements in GaAs and InGaAs QWs demonstrates the accuracy and potential utility of the theory.

#### ACKNOWLEDGMENTS

The authors thank the Brazilian agencies CNPq, FAPESP, CAPES, and FAPESB for financial support. E.A.A.S. is also thankful to the Scuola Normale Superiore di Pisa, for the kind hospitality during part of this work.

#### APPENDIX

In this Appendix, we give the solution used here for the energy and envelope function of an electron confined in a

square QW, described by the Kane model. It is an exact solution where the envelope function for the first subband is given by:

$$f^{(0)}(z) = \begin{cases} A_b e^{-k_b|z|} & , \quad |z| \geq L/2 \\ A_w \cos k_w z & , \quad |z| \leq L/2 \end{cases} \quad (\text{A1})$$

where  $k_w = \sqrt{2m_w \varepsilon_0 / \hbar^2}$  and  $k_b = \sqrt{2m_b(v_0 - \varepsilon_0) / \hbar^2}$  ( $v_0$  being the QW barrier height, i.e., the interface conduction band offset). From the normalization and boundary conditions, one then obtains

$$A_b = \left\{ \frac{e^{-k_b L}}{k_b} \left[ 1 + \frac{k_b}{2k_w} \frac{\sin(k_w L) + k_w L}{\cos^2(k_w L/2)} \right] \right\}^{-1/2}, \quad (\text{A2})$$

$$A_w = A_b \frac{e^{-k_b L/2}}{\cos(k_w L/2)} \quad (\text{A3})$$

and that the subband energy  $\varepsilon_0$  is given by the lowest solution of the following transcendental equation:

$$\tan(k_w L/2) = \sqrt{\frac{m_w}{m_b} \left( \frac{2m_w v_0}{\hbar^2 k_w^2} - 1 \right)}. \quad (\text{A4})$$

Recall that the effective masses  $m_w$  and  $m_b$  are energy dependent, i.e.,  $m_{w,b} = m_{w,b}(\varepsilon_0)$  as given by Eq. (6).

- 
- <sup>1</sup>L. M. Roth, B. Lax, and S. Zwerdling, *Phys. Rev.* **114**, 90 (1959).
- <sup>2</sup>N. Kim, G. C. La Rocca, and S. Rodriguez, *Phys. Rev. B* **40**, 3001 (1989).
- <sup>3</sup>T. P. Smith III and F. F. Fang, *Phys. Rev. B* **35**, 7729 (1987).
- <sup>4</sup>M. J. Snelling, G. P. Flinn, A. S. Plaut, R. T. Harley, A. C. Tropper, R. Eccleston, and C. C. Phillips, *Phys. Rev. B* **44**, 11345 (1991).
- <sup>5</sup>R. M. Hannak, M. Oestreich, A. P. Heberle, W. W. Rühle, and K. Köhler, *Solid State Commun.* **93**, 313 (1995).
- <sup>6</sup>Q. X. Zhao, M. Oestreich, and N. Magnea, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 3704 (1996).
- <sup>7</sup>A. A. Sirenko, T. Ruf, M. Cardona, D. R. Yakovlev, W. Ossau, A. Waag, and G. Landwehr, *Phys. Rev. B* **56**, 2114 (1997).
- <sup>8</sup>P. Le Jeune, D. Robart, X. Marie, T. Amand, M. Brosseau, J. Barrau, and V. Kalevcih, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 380 (1997).
- <sup>9</sup>A. Malinowski and R. T. Harley, *Phys. Rev. B* **62**, 2051 (2000).
- <sup>10</sup>X. C. Zhang, K. Ortner, A. Pfeuffer-Jeschke, C. R. Becker, and G. Landwehr, *Phys. Rev. B* **69**, 115340 (2004).
- <sup>11</sup>S. Tomimoto, S. Nozawa, Y. Terai, S. Kuroda, K. Takita, and Y. Masumoto, *Phys. Rev. B* **81**, 125313 (2010).
- <sup>12</sup>E. L. Ivchenko and A. A. Kiselev, *Fiz. Tekh. Poluprovodn. (S.-Peterburg)* **26**, 1471 (1992) [*Sov. Phys. Semicond.* **26**, 827 (1992)].
- <sup>13</sup>E. Ivchenko, A. Kiselev, and M. Willander, *Solid State Commun.* **102**, 375 (1997).
- <sup>14</sup>A. A. Kiselev, E. L. Ivchenko, and U. Rössler, *Phys. Rev. B* **58**, 16353 (1998).
- <sup>15</sup>A. A. Kiselev, K. W. Kim, and E. L. Ivchenko, *Phys. Status Solidi B* **215**, 235 (1999).
- <sup>16</sup>R. Kotlyar, T. L. Reinecke, M. Bayer, and A. Forchel, *Phys. Rev. B* **63**, 085310 (2001).
- <sup>17</sup>M. de Dios-Leyva, E. Reyes-Gómez, C. A. Perdomo-Leiva, and L. E. Oliveira, *Phys. Rev. B* **73**, 085316 (2006).
- <sup>18</sup>P. Pfeffer and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **74**, 233303 (2006).
- <sup>19</sup>A. Bruno-Alfonso, F. E. López, N. Raigoza, and E. Reyes-Gómez, *Eur. Phys. J. B* **74**, 319 (2010).
- <sup>20</sup>Z. Wilamowski, W. Jantsch, H. Malissa, and U. Rössler, *Phys. Rev. B* **66**, 195315 (2002).
- <sup>21</sup>J. S. de Sousa, H. Detz, P. Klang, E. Gornik, G. Strasser, and J. Smoliner, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 152107 (2011).
- <sup>22</sup>Note that  $g_{\text{QW}}^*$  has been studied also with the Ogg-McCombe Hamiltonian<sup>17,19</sup> and with  $14 \times 14 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  model.<sup>18</sup>
- <sup>23</sup>E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **50**, 8523 (1994).
- <sup>24</sup>E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **55**, 16293 (1997).
- <sup>25</sup>G. Brozak, E. A. de Andrada e Silva, L. J. Sham, F. DeRosa, P. Miceli, S. A. Schwarz, J. P. Harbison, L. T. Florez, and S. J. Allen, Jr., *Phys. Rev. Lett.* **64**, 471 (1990).
- <sup>26</sup>Assuming that the Kane model gives a perfect description of the 8 bands it does include,  $\delta g_{\text{rem}}$  is then given by the difference between the  $g$  factor measured experimentally in the bulk and that given by the Roth formula of Eq. (1).
- <sup>27</sup>L. G. Gerchikov and A. V. Subashiev, *Fiz. Tekh. Poluprovodn. (S.-Peterburg)* **26**, 131 (1992) [*Sov. Phys. Semicond.* **26**, 73 (1992)].
- <sup>28</sup>Note that in a flat band QW,  $\alpha_R = \frac{d}{dz} \beta$  is different than zero only at the interfaces.
- <sup>29</sup>Note that for  $B = 0$ ,  $f_{k_x}^{(0)} = f^{(0)}$ , i.e., does not depend on the center of the orbit; and that we consider the bottom of the subband corresponding to  $k_x = 0$ .
- <sup>30</sup>The values of the parameters used, indicated in the figure captions, are as in Refs. 23 and 24, except for the experimental bulk  $g$  factors, which are from Refs. 8 and 9 [see also H. Kosada *et al.*, *Electron. Lett.* **37**, 464 (2001)].
- <sup>31</sup>W. S. Chi and Y. S. Huang, *Semicond. Sci. Technol.* **10**, 127 (1995).



## Variational Rashba splitting in two-dimensional electron gases in III-V semiconductor heterojunctions

M. A. Toloza Sandoval,<sup>1</sup> A. Ferreira da Silva,<sup>1</sup> E. A. de Andrada e Silva,<sup>2</sup> and G. C. La Rocca<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, 40210-340 Salvador, Bahia, Brazil*

<sup>2</sup>*Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, CP 515, 12201-970 São José dos Campos, SP, Brazil*

<sup>3</sup>*Scuola Normale Superiore and CNISM, Piazza dei Cavalieri 7, I-56126 Pisa, Italy*

(Received 13 March 2009; revised manuscript received 27 April 2009; published 3 June 2009)

Control of the Rashba spin-orbit coupling in semiconductor two-dimensional electron gases (2DEGs) is of fundamental interest to the rapidly evolving semiconductor spintronics and depends on the detailed knowledge of the controversial interface and barrier penetration effects. Based on the  $8 \times 8$   $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Kane model for the bulk, we propose a spin-dependent variational solution for the conduction subbands of III-V heterojunctions, which reveals analytically the different contributions to the Rashba splitting and its dependency on heterostructure and band parameters as the band offset and effective masses. Perturbation expansions are used to derive renormalized parameters for an effective, simple, and yet accurate one band model. Spin-dependent modified Fang-Howard trial functions, which satisfy the spin-dependent boundary conditions, are then introduced. The subband splitting is given as a function of the variational parameter which is obtained minimizing the total energy of the 2DEG. Our calculations applied to InAlAs/InGaAs heterojunctions, where a near 20% increase in the splitting is observed due to the barrier penetration, are in good agreement with both experiment and exact numerical calculations. Well-known expressions in the limit of a perfect insulating barrier are exactly reproduced.

DOI: [10.1103/PhysRevB.79.241305](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.241305)

PACS number(s): 73.20.-r, 73.21.Fg, 78.67.De

The desired control of the spin-orbit splitting for two-dimensional (2D) electron gases (2DEGs) in III-V semiconductor heterojunctions, as in the Datta and Das spin transistor, has not been achieved yet. The quantitative agreement between theory and experiment is far from complete. Among different studies, there are in particular long-standing controversies concerning the barrier and boundary effects,<sup>1,2</sup> as well as regarding the splitting dependence on the electron density and the consistency among the different experimental methods.<sup>3-5</sup>

In view of the spintronics, semiconductor heterojunctions form a special class of Rashba split 2DEGs. The electrons are confined by a triangular potential and the strength of the Rashba coupling as well as the electron density ( $n_s$ ) can be varied with the gate voltage. Different experiments have been quantitatively interpreted with a simple model for the 2DEGs,<sup>6</sup> i.e.,  $H_c = \hbar^2(k_x^2 + k_y^2)/2m^* + \alpha^* \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \times \mathbf{e}_z$ , where the Rashba coupling parameter derived from Kane model in the infinite barrier approximation<sup>7</sup> is given by

$$\alpha^* = \frac{\hbar^2 \Delta}{2m^* E_g} \frac{2E_g + \Delta}{(E_g + \Delta)(3E_g + 2\Delta)} eE. \quad (1)$$

Here the band parameters are those of the well material and  $E$  is the confining electric field seen by the 2DEG near the interface. The spin splitting at the Fermi level is then given by  $\delta\varepsilon = 2\alpha^* k_F$ . However, this model has some limitations because it does not include nonparabolicity, barrier penetration, and spin-dependent boundary conditions known to lead to sizable corrections.<sup>2,8-13</sup> There is, however, no simple or consensus way to include or calculate these effects which are usually included through numerical integration of multiband models.<sup>2,8-12</sup> The problems with such numerical calculations are the spurious solutions, *ad hoc* operator symmetrization,

and the lack of transparency concerning the different contributions to the Rashba splitting and its dependency on the various parameters.

Here, we propose a variational solution for the spin-resolved heterojunction electronic structure within the multiband envelope-function approximation which is free from the above concerns, allowing for the analytical discrimination of the different contributions to the strength of the Rashba effect. The dispersion relation of the spin-split conduction subbands is analytically obtained as a function of the variational parameter determined by the exact minimization of the total energy of the 2DEG. The obtained Rashba spin-orbit splitting for InAlAs/InGaAs heterojunctions results in reasonably good agreement with recent measurements<sup>14</sup> and numerical calculations.<sup>10-12</sup>

With the proper choice of parallel wave vector and spin-quantization directions, and using the eight-band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Kane model, the spin-resolved effective Hamiltonian for the 2D conduction subbands can be written as<sup>13,15</sup>

$$H_{\text{eff}\pm} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon_{\pm})} \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m(z, \varepsilon_{\pm})} + E_c(z) + v(z) \mp \left[ \frac{d}{dz} \beta(z, \varepsilon_{\pm}) \right] k, \quad (2)$$

where  $v(z)$  is the confining electrostatic potential,  $E_c(z)$  is the conduction-band-edge profile, and  $m(z, \varepsilon_{\pm})$  and  $\beta(z, \varepsilon_{\pm})$  are described by simple expressions in terms of the bulk band parameters.<sup>13</sup>  $\varepsilon_{\pm} \equiv \varepsilon_{\pm}(k)$  are the subband dispersion relations, we are looking for,  $k$  being the wave vector parallel to the interface. We indicate with  $\Psi_{\pm}$  the conduction-band envelope function for spin up (+) or down (-) along the in-plane direction perpendicular to  $\mathbf{k}$ . From the Schrödinger

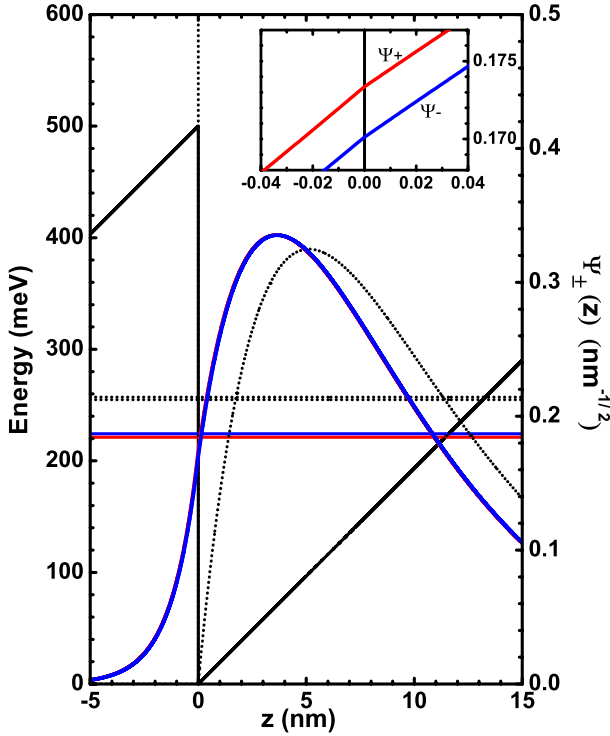


FIG. 1. (Color online) Potential profile obtained envelope functions and spin-split energies at  $k_F$  for  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  heterojunctions with  $n_s = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Spin-dependent modified Fang-Howard trial functions are shown, with the axis on the right. The dotted lines give the infinite or perfect insulating barrier approximation, i.e., insulator/ $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ . The inset expands the interface region to show more clearly the spin dependency of the envelope function. The band parameters used are  $m^* = 0.041m_e$ ,  $E_g = 0.813 \text{ eV}$ , and  $\Delta = 0.326 \text{ eV}$  for  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  and for  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ :  $E_g = 1.513 \text{ eV}$ ,  $\Delta = 0.309 \text{ eV}$  and  $m^* = 0.073m_e$  (obtained with the assumption of equal momentum matrix element, fixed with  $m^*$  in the well).  $\epsilon_{sc} = 13.1\epsilon_0$  and for the conduction-band offset we have used  $v_0 = 0.5 \text{ eV}$ . With these parameters,  $\bar{m}_1 = 0.05m_e$ .

equation with the above effective Hamiltonian, within standard envelope-function approximation,<sup>16</sup> one gets that besides  $\Psi_{\pm}$  (Refs. 13, 17, and 18)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dz} \Psi_{\pm} \mp \beta k \Psi_{\pm} \quad (3)$$

must also be continuous, representing the so-called spin-dependent boundary conditions for the envelope functions. Considering III-V semiconductor heterojunctions, the 2DEG is confined near the interface by a triangular potential formed by the electrostatic potential plus the conduction-band offset, as illustrated in Fig. 1. In this case,  $v(z) = eEz$ , with the electric field given by  $E = en_s / \epsilon_{sc}$ , where  $n_s$  is the 2D density of electrons and  $\epsilon_{sc}$  is the dielectric constant. The system is assumed to be infinite along the plane of the interface and differences in  $\epsilon_{sc}$  are neglected for simplicity.

It is shown that by making slightly different approximations for  $H_{\text{eff}\pm}$  on the two sides of the heterojunction, it is possible to obtain accurate variational solutions for  $\epsilon_{\pm}(k)$ . In

the barrier region ( $z < 0$ ), since our energies of interest lay here inside the gap, we extend the work of Brozak *et al.*<sup>19</sup> for the perturbation expansion of the parameters by using a  $8 \times 8 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  model, instead of the  $4 \times 4$  model used by them. In this way, we obtain not only the renormalized effective mass  $\bar{m}$  but also a renormalized Rashba coupling parameter  $\bar{\alpha}$ , which include nonparabolicity corrections. In the quantum well region ( $z > 0$ ), following our earlier work references,<sup>7,13</sup> we expand  $m$  and  $\beta$  in a power series in terms of the small parameter  $(\epsilon_{\pm} - eEz)/(E_g + \Delta)$  and take only the leading-order terms. As a result, the following effective Hamiltonian is obtained:

$$H_{\text{eff}\pm} = \bar{H}_{\pm} \theta(-z) + H_{\pm}^* \theta(z), \quad (4)$$

with

$$\bar{H}_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2\bar{m}} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k^2 \right) + v_0 + eEz \mp \bar{\alpha}k \quad (5)$$

and

$$H_{\pm}^* = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k^2 \right) - a \frac{\left[ \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k^2 \right) \right]^2}{E_g + \Delta} + eEz \mp \alpha^*k. \quad (6)$$

Note that the band parameters (i.e.,  $m^*$ ,  $E_g$ , and  $\Delta$ ) to be used in  $\bar{H}_{\pm}$  are those of the barrier material, while in  $H_{\pm}^*$ , those of the well material, and that  $v_0 = E_c^{(1)} - E_c^{(2)}$  gives the band offset or barrier height. The conduction-band-edge effective mass ( $m^*$ ), the nonparabolicity parameter ( $a$ ), and the Rashba coupling ( $\alpha^*$ ) are exactly as obtained in Ref. 7, while the renormalized parameters in the barrier region read as

$$\frac{1}{\bar{m}} = \frac{1}{m^*} \frac{E_g(E_g + \Delta)}{3E_g + 2\Delta} \frac{3(E_g - v_0) + 2\Delta}{(E_g - v_0)(E_g - v_0 + \Delta)} \quad (7)$$

and

$$\bar{\alpha} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{E_g(E_g + \Delta)}{3E_g + 2\Delta} \frac{2\Delta(E_g - v_0) + \Delta^2}{(E_g - v_0)^2(E_g - v_0 + \Delta)^2} eE. \quad (8)$$

As expected, they reduce exactly to their corresponding band-edge values  $m^*$  and  $\alpha^*$ , as  $v_0$  goes to zero. Accordingly, the boundary conditions are now given by

$$-\frac{\hbar^2}{2\bar{m}_1} \frac{d}{dz} \Psi_{1\pm} \mp \bar{\beta}_1 k \Psi_{1\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{d}{dz} \Psi_{2\pm} \mp \beta_2^* k \Psi_{2\pm}, \quad (9)$$

with

$$\bar{\beta} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Delta}{3E_g + 2\Delta} \frac{E_g(E_g + \Delta)}{(E_g - v_0)(E_g - v_0 + \Delta)} \quad (10)$$

[note that similarly to  $m$  and  $\alpha$ ,  $\beta^* = \bar{\beta}(v_0 = 0)$ ]. Hereafter we shall use for all the parameters index 1 in the barrier region and index 2 in the quantum well region.

We now introduce the following spin-dependent modified Fang-Howard trial functions that satisfy the above conditions and allow a simple variational solution for the first subband,

TABLE I. The different terms of the effective Hamiltonian used in the calculation of the energy expectation values and the Rashba variational splitting.

$T_{\pm}$	$\langle \hbar^2/2[1/\bar{m}\theta(-z)+1/m^*\theta(z)](-d^2/dz^2+k^2) \rangle_{\pm}$
$T_{np\pm}$	$\langle -a([\hbar^2/2m^*(-d^2/dz^2+k^2)]^2/E_g+\Delta)\theta(z) \rangle_{\pm}$
$V_{\pm}$	$\langle eEz+v_0\theta(-z) \rangle_{\pm}$
$V_{so\pm}$	$\langle \mp[\bar{\alpha}\theta(-z)+\alpha^*\theta(z)]k \rangle_{\pm}$

including the Rashba, nonparabolicity, and barrier penetration effects,

$$\Psi_{\pm}(z) = \begin{cases} \Psi_{1\pm} = A_{\pm}e^{k_b z/2}, & z \leq 0 \\ \Psi_{2\pm} = B_{\pm}(z+c_{\pm})e^{-bz/2}, & z \geq 0, \end{cases} \quad (11)$$

where  $k_b = 2\sqrt{2\bar{m}_1 v_0/\hbar^2}$  and  $b$  is the variational parameter.<sup>20</sup> The boundary conditions impose  $A_{\pm} = B_{\pm}c_{\pm}$  and lead to

$$c_{\pm} = \frac{2}{b + \frac{m_2^*}{m_1}k_b \pm 4\frac{m_2^*}{\hbar^2}(\bar{\beta}_1 - \beta_2^*)k}, \quad (12)$$

where it is seen an analytical and explicit coupling between the spin and the dynamic variable  $k$  of the 2D electrons, which can be of great interest in the study of spin photocurrents, for example. Finally, normalization sets  $B_{\pm} = \sqrt{(b^3/2)/[1+bc_{\pm}+b^2c_{\pm}^2/2(1+b/k_b)]}$ .

Using these trial functions for the spin-polarized first subbands, the energy levels will be given by

$$\varepsilon_{\pm}(k) = \langle \Psi_{\pm} | H_{\text{eff}\pm} | \Psi_{\pm} \rangle = \langle H_{\text{eff}\pm} \rangle_{\pm}, \quad (13)$$

where, for a given electron density  $n_s$ , the value of  $b$  is determined by minimizing the total energy, i.e., the sum over all the electrons, considering the electron-electron interaction in the Hartree approximation. For the heterojunction in Fig. 1, we obtain  $b=0.42 \text{ nm}^{-1}$  ( $b=0.39 \text{ nm}^{-1}$  for insulator/InGaAs); the dependence with both  $k$  and spin is negligible. The expectation values  $\langle H_{\text{eff}\pm} \rangle_{\pm}$  composed by the different terms listed in Table I are easily calculated<sup>21</sup> and in the limit of infinite barrier reduce exactly to the previous results in Ref. 7.

Figures 1 and 2 show the obtained results for a 2DEG in an  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  heterojunction with  $n_s = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . In Fig. 1 we show the energy levels at  $k_F$  and the modified Fang-Howard envelope function in both finite and infinite barrier (dotted line) approximations. The spin dependence can be seen in the inset with a closer view of the interface region. Figure 2(a) shows the spin splitting as a function of the parallel wave vector. In the inset, we show the subband dispersion relations, with the parabolic approximation (dashed line). The splitting up to  $k_F$  is seen to be linear with  $k$ ; but for larger  $k$ s, it flattens and reaches a maximum as expected.<sup>10,13</sup> From the obtained energy splitting of the states at the Fermi level, i.e.,  $\delta\varepsilon = |\langle H_{\text{eff}+} \rangle_+ - \langle H_{\text{eff}-} \rangle_-| = 2\alpha_{\text{eff}}k_F$ , an effective (variational) Rashba coupling parameter  $\alpha_{\text{eff}}$  can be defined, which in this case is seen to be around 20% larger than  $\alpha^*$  in Eq. (1), corresponding to the infinite barrier approximation. This is

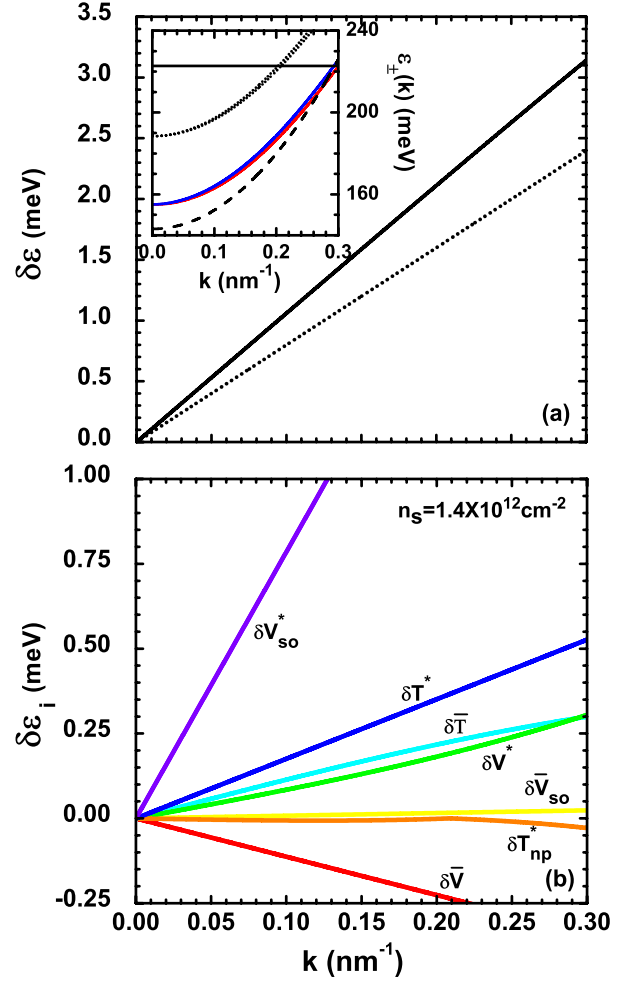


FIG. 2. (Color online) (a) Total Rashba spin-orbit splitting for a  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  heterojunction. The inset shows the spin-split conduction subband dispersion relations and parabolic approximation (dashed line). The dotted lines show the limit case, i.e., insulator/ $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ . (b) Rashba spin-splitting contributions.

due to different new contributions allowed with barrier penetration. In the lower panel [Fig. 2(b)], these different contributions are plotted with the notation of Table I. The effective Hamiltonian (4) and the corresponding Rashba splitting can be written as a sum of the different terms listed in Table I, i.e.,  $H_{\text{eff}\pm} = \sum_i H_{\text{eff}\pm}^{(i)}$ , and  $\delta\varepsilon = \sum_i \delta\varepsilon_i \geq 0$ , respectively, with  $\delta\varepsilon_i = \langle H_{\text{eff}\pm}^{(i)} \rangle_{\pm} - \langle H_{\text{eff}\mp}^{(i)} \rangle_{\mp}$ . These contributions can be further separated into barrier and well components, recalling that  $T_{\pm} = \bar{T}_{\pm} + T_{\pm}^*$  and similarly for  $V$  and  $V_{so}$ .

It is interesting to note that all the contributions are not exactly but approximately linear with  $k$  and that there are both positive and negative new contributions due to barrier penetration. In the limit of infinite barrier, only  $\delta V_{so}^*$  survives, all the other terms go to zero (the envelope function becomes independent of the spin and no contributions from the kinetic and potential energies in the well are seen), and one gets  $\alpha_{\text{eff}} = \alpha^*$ . Instead, when barrier penetration is allowed due to the spin-dependent trial functions, all the different terms in  $H_{\text{eff}}$  have different expectation values for each spin direction. As seen in Fig. 2(b), they partially cancel each other, leading anyway to a net increase in the total splitting.

The biggest contribution is from the kinetic energy (within both well and barrier) due to the small difference between the envelope functions with opposite spins shown in Fig. 1.

Recently, Yang *et al.*<sup>14</sup> studied the Shubnikov–de Haas oscillations in an  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterojunction with  $x=0.53$  near the interface and  $n_s=1.4\times 10^{12}\text{ cm}^{-2}$  and measured a difference in the spin-resolved population corresponding to  $\delta n/n_s\sim 0.023$  ( $\delta n=|n_+-n_-|$ ). Our model gives  $\delta n/n_s\sim 0.026$  ( $n_{\pm}=k_{\pm}^2/4\pi$ ) corresponding to  $\alpha_{\text{eff}}=5.2\times 10^{-12}\text{ eV m}$ , which is reduced to  $\alpha^*=4.0\times 10^{-12}\text{ eV m}$  in the infinite barrier approximation. This indicates that Rashba is the dominant spin-orbit term in this structure. In fact using an effective Dresselhaus parameter  $\gamma\sim 30\text{ eV \AA}^3$ ,<sup>22</sup> we estimate a pure Dresselhaus splitting  $\delta\varepsilon_D\sim 2\gamma k_F(b^2/4)\sim 0.7\text{ meV}$ , three times smaller than the obtained Rashba splitting.<sup>23</sup> Besides such correction, the detailed comparison with experiment is not possible due to the uncertainty in the actual confining electric field.

To conclude, we have presented a variational framework

for the calculation of the Rashba spin-orbit splitting in III-V semiconductor heterojunctions, which leads to accurate and simple expressions, with explicit dependence on the different bulk band parameters and reveals the different contributions to the Rashba splitting. It has been applied here to InGaAs inversion layers; nevertheless the theory is general and can be applied to any III-V heterojunction. Preliminary results for GaAs and InSb heterojunctions show also similar good agreement with previous studies.<sup>21</sup> The transparency and simplicity of the present model can be of great help to fabricate and/or optimize new devices in spintronics. It also helps clarifying the controversial role of the interface in the Rashba effect. Finally, good agreement with both experimental data and exact numerical calculations further supports its accuracy.

The authors thank the Brazilian agencies CNPq, CAPES, and FAPESB for financial support.

- 
- <sup>1</sup>I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- <sup>2</sup>U. Ekenberg and D. M. Gvozdic, *Phys. Rev. B* **78**, 205317 (2008).
- <sup>3</sup>T. Matsuyama, R. Kürsten, C. Meißner, and U. Merkt, *Phys. Rev. B* **61**, 15588 (2000).
- <sup>4</sup>C. Schierholz, T. Matsuyama, U. Merkt, and G. Meier, *Phys. Rev. B* **70**, 233311 (2004).
- <sup>5</sup>M. Akabori, V. A. Guzenko, T. Sato, T. Schapers, T. Suzuki, and S. Yamada, *Phys. Rev. B* **77**, 205320 (2008).
- <sup>6</sup>E. I. Rashba, *Sov. Phys. Solid State* **2**, 1109 (1960); Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, *JETP Lett.* **39**, 78 (1984).
- <sup>7</sup>E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **50**, 8523 (1994).
- <sup>8</sup>Jun Li, Kai Chang, G. Q. Hai, and K. S. Chan, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 152107 (2008).
- <sup>9</sup>S. Lamari, *Phys. Rev. B* **75**, 155302 (2007).
- <sup>10</sup>W. Yang and K. Chang, *Phys. Rev. B* **73**, 113303 (2006).
- <sup>11</sup>W. Zawadzki and P. Pfeffer, *Semicond. Sci. Technol.* **19**, R1 (2004).
- <sup>12</sup>R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer Tracts in Modern Physics Vol. 191 (Springer-Verlag, Berlin, 2003).
- <sup>13</sup>E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **55**, 16293 (1997).
- <sup>14</sup>C. L. Yang, H. T. He, L. Ding, L. J. Cui, Y. P. Zeng, J. N. Wang, and W. K. Ge, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 186605 (2006).
- <sup>15</sup>L. G. Gerchikov and A. V. Subashiev, *Sov. Phys. Semicond.* **26**, 73 (1992).
- <sup>16</sup>M. G. Burt, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 6651 (1992).
- <sup>17</sup>F. T. Vasko, *JETP Lett.* **30**, 541 (1979).
- <sup>18</sup>R. A. Suris and A. B. Sokolski, *Sov. Phys. Semicond.* **21**, 529 (1987).
- <sup>19</sup>G. Brozak, E. A. de Andrada e Silva, L. J. Sham, F. DeRosa, P. Miceli, S. A. Schwarz, J. P. Harbison, L. T. Florez, and S. J. Allen, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 471 (1990).
- <sup>20</sup>G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Editions de Physique, Les Ulis, 1990).
- <sup>21</sup>M. A. Toloza Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca (unpublished).
- <sup>22</sup>J. M. Jancu, R. Scholz, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **72**, 193201 (2005).
- <sup>23</sup>Recent data in Ref. 5 indicate that in InAlSb/InGaSb 2DEGs instead, the Dresselhaus contribution can dominate. However, a different extended trial function is necessary when discussing this common case of narrow wells with barrier penetration on both sides.

**Variational analysis of the Rashba splitting in III–V semiconductor inversion layers**

M. A. Toloza Sandoval and A. Ferreira da Silva

*Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, 40210-340 Salvador, Bahia, Brazil*

E. A. de Andrada e Silva\*

*Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, INPE, C.P. 515, 12201-970 São José dos Campos, São Paulo, Brazil*

G. C. La Rocca

*Scuola Normale Superiore and CNISM, Piazza dei Cavalieri 7, I-56126 Pisa, Italy*

(Received 7 May 2010; revised manuscript received 6 March 2011; published 10 June 2011)

A spin-dependent variational theory is used to analyze the Rashba spin-orbit splitting in two-dimensional electron gases formed in III–V semiconductor inversion layers. The spin split conduction subbands in CdTe/InSb, insulator/InAs, InP/InGaAs, InAlAs/InGaAs, and AlGaAs/GaAs heterojunctions are calculated. The theory, presented here in detail, is based on the  $8 \times 8 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Kane model and on the introduction of simple and convenient spin-dependent Fang-Howard trial functions, and leads to analytical expressions for the split subbands, as well as allows for a detailed knowledge of the Rashba spin-orbit coupling, including its explicit dependence on structure parameters and its decomposition into separate contributions. The Rashba coupling parameter and the population difference in the spin-split subbands, as experimentally determined from the beating pattern of the Shubnikov-de Haas (SdH) oscillations, are obtained as a function of the electron density ( $n_s$ ). The separate contributions to the particularly large Rashba splitting in CdTe/InSb heterojunctions are also computed and discussed. It is shown, for example, that due to the spin-dependent boundary conditions, the direct Rashba spin-orbit coupling term in the effective Hamiltonian dominates the splitting only for  $n_s > 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  while it is the barrier penetration kinetic energy term that gives the largest contribution to the Rashba effect at lower densities.

DOI: [10.1103/PhysRevB.83.235315](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.235315)

PACS number(s): 71.70.Ej, 71.15.Ap, 73.21.Fg, 85.75.–d

**I. INTRODUCTION**

A main trend in semiconductor spintronics concerns the manipulation of the electron spin with the use of electric fields only, i.e., without external magnetic fields or ferromagnetic materials.<sup>1</sup> This is possible with the use of the spin-orbit coupling. In particular, the Rashba effect in III–V semiconductor inversion layers has been studied much, since it allows for a direct and convenient gate-voltage control of the electron spin precession in the two-dimensional electron gases (2DEGs) conducting channels. The effect can be described by means of an effective magnetic field seen by the moving electron due to the Lorentz transformed electric field. However, the calculation or measurement of such magnetic field at semiconductor heterointerfaces is a complex and unsolved problem. In particular, the effects of band offset and barrier penetration, connected to the boundary conditions at the interface, have been somewhat controversial.<sup>2,3</sup> In order to better understand and apply the effect, further analysis is necessary. In particular, the decomposition of the resulting spin splitting into separate contributions would be very helpful. However, this is not a simple task with most of the model calculations available to study the Rashba effect.<sup>4</sup>

A spin-dependent variational solution within standard envelope function approximation was recently developed, which is in good agreement with both the experimental results and the exact numerical calculations, and able to analytically distinguish the different contributions to the Rashba coupling in III–V semiconductor inversion layers.<sup>5</sup> Here we apply this theory to analyze the Rashba effect in III–V semiconductor inversion layers. We calculate the

Rashba coupling parameter, study its composition, and present specific results for CdTe/InSb, insulator/InAs, InP/InGaAs, InAlAs/InGaAs, and AlGaAs/GaAs systems, as a function of the 2DEG electron density. The corresponding population difference in the split subbands, as experimentally determined from the beating pattern of the SdH oscillations, is also obtained. The theory is shown to well reproduce the main known properties of the Rashba effect and thus to improve our knowledge about it. As an example, the particularly large Rashba splitting in CdTe/InSb heterojunctions is shown to be dominated by the usual (direct) Rashba spin-orbit term in the effective Hamiltonian only for electron densities higher than  $10^{10} \text{ e/cm}^2$ . For lower densities, the barrier penetration kinetic energy term becomes the dominant one. The theory is presented here with important details which were missing in Ref. 5, like intermediate analytical results for the energy integrals and directions for the correct use of its parameters.

In 2DEGs formed at such junctions, the conducting electrons are confined near the interface by an electric field  $\mathcal{E}$  plus the barrier due to the conduction band offset  $v_0$ , which form an approximate triangular potential. The confining electric field, and therefore the resulting Rashba coupling parameter, can be modulated by the gate voltage or carrier density ( $n_s$ ) of the 2DEG. The physics of such system has been much studied, mostly with the effective 2D Hamiltonian  $H_c = \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m^* + \alpha^* \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \times \mathbf{e}_z$ , with  $\mathbf{k}_{\parallel} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$ . The resulting Rashba splitting at the Fermi energy is then simply given by  $\delta\varepsilon = 2\alpha^* k_F$ . In the infinite barrier approximation, simple expressions for the Rashba coupling parameter ( $\alpha^*$ ) can be derived from  $8 \times 8 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Kane model,<sup>6</sup> dependent only on the band parameters of the well material. The present work

extends this scheme in order to add the contributions due to the barrier penetration and to the spin-dependent boundary conditions. We first review the variational theory in Ref. 5, starting with the  $8 \times 8$  Kane model applied to heterojunctions, and then discussing the perturbation expansions used to derive renormalized band parameters of the effective Hamiltonian, and its variational solution with the introduction of spin-resolved Fang-Howard trial functions. Finally, we present and discuss the results for the Rashba coupling parameter and population difference in the split subbands of different III–V semiconductor heterojunctions, as a function of the total 2DEG carrier density.

## II. KANE MODEL FOR HETEROJUNCTIONS

It is well known that, with an appropriate choice of spin quantization direction (i.e.,  $\mathbf{k}_{\parallel} \times \mathbf{e}_z$ ), the  $8 \times 8$  effective Hamiltonian based on Kane's model can be block diagonalized into two  $4 \times 4$  blocks, one for each of the two Rashba split electron subbands.<sup>6–8</sup> The equations corresponding to each block can be resolved (downfolded) for the conduction band envelope function  $\Psi$ , which is then seen to be the eigenfunction of the following effective Hamiltonian, in which the Rashba coupling (the spin-dependent term below, also called direct Rashba coupling term) is in a simple form:

$$H_{\text{eff}\pm} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon_{\pm})} \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m(z, \varepsilon_{\pm})} + E_c(z) + U(z) \mp \left[ \frac{d}{dz} \beta(z, \varepsilon_{\pm}) \right] k_{\parallel} \quad (1)$$

with

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

and

$$\beta(z, \varepsilon_{\pm}) = \frac{P^2}{2} \left[ \frac{1}{\varepsilon_{\pm} - U(z) - E_v(z)} - \frac{1}{\varepsilon_{\pm} - U(z) - E_v(z) + \Delta(z)} \right], \quad (3)$$

where  $z$  is the growth direction,  $E_c$ ,  $E_v$ , and  $\Delta$ , respectively, stand for the conduction band edge, the valence band edge, and the valence band spin-orbit splitting, and  $U(z)$  is the electrostatic potential energy. The  $\pm$  signs correspond to spin up and down along the spin quantization direction;  $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon_{\pm}(k_{\parallel})$  give the spin-split subband dispersion relations we are looking for; and  $P$  is the usual interband momentum matrix element, which is assumed to be constant and is calculated with the measured conduction band effective mass in the well material. The corresponding boundary conditions at the interface are that the envelope functions  $\Psi_{\pm}$  must be continuous, as well as

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dz} \Psi_{\pm} \mp \beta k_{\parallel} \Psi_{\pm}. \quad (4)$$

These are the so-called spin-dependent boundary conditions for the spin-dependent envelope functions.

Note that in this model, the  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  interactions between the conduction band  $\Gamma_6$  and the valence bands  $\Gamma_8$  and  $\Gamma_7$  are fully, or exactly considered, i.e., not as a perturbation,<sup>9</sup> and are free from any ambiguity connected to choices of operator ordering or spurious solutions.

### A. Perturbation expansion

Consider now a heterojunction between semiconductors 1 ( $z \leq 0$ ) and 2 ( $z \geq 0$ ). Near the interface at  $z = 0$ , the electrostatic potential energy is approximately given by  $U(z) = e\mathcal{E}z$ , with the uniform electric field given by  $\mathcal{E} = en_s/\varepsilon_{sc}$ , where  $n_s$  is electronic density of the 2DEG and  $\varepsilon_{sc}$  is the dielectric constant. This is obtained by assuming that the system is infinite along the plane of the interface and by neglecting differences in  $\varepsilon_{sc}$ . The corresponding confining potential in the case of a CdTe/InSb heterojunction (in which the Rashba effect is particularly strong), with  $n_s = 2.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  is shown in Fig. 1.

Despite its one-band appearance, Eq. (1) corresponds to the multiband effective mass equation, and must in general be solved by numerical integration, due to the energy and  $z$  dependences on  $m$  and  $\beta$ . However, for the lower lying electronic energy states in such heterojunctions, an amenable

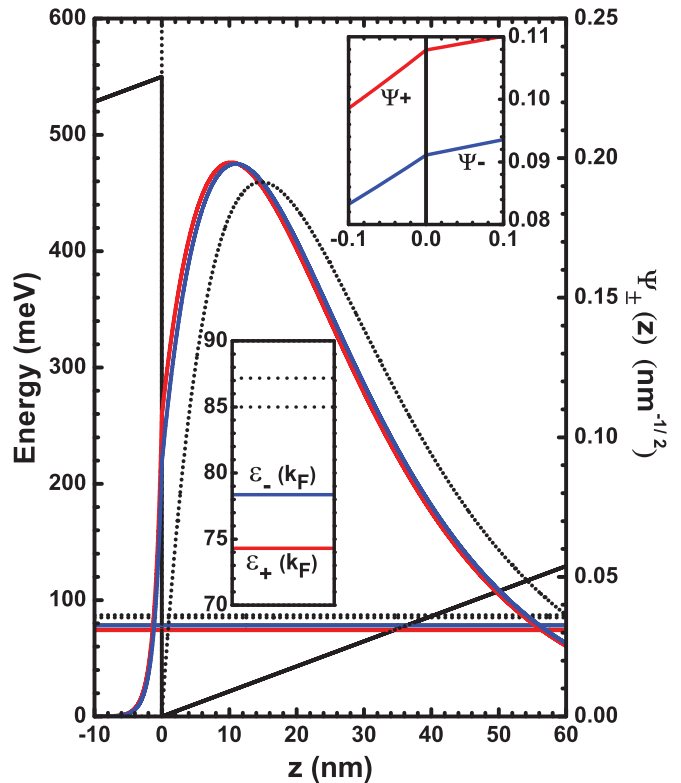


FIG. 1. (Color online) Confining potential, spin-dependent envelope functions, and spin-split energies at  $k_F$  for a 2DEG in a CdTe/InSb heterojunction, with  $n_s = 2.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . The upper inset expands the interface region to better show the spin dependency of the envelope function. The lower inset shows the value of the Rashba splitting at the Fermi Level. The dotted lines correspond to the perfect insulating barrier approximation, i.e., insulator/InSb.

form of the effective Hamiltonian can be obtained by choosing an appropriate small parameter  $\delta$  to expand these quantities in a power series, i.e.,

$$\frac{1}{m} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{A}_n \delta^n \quad \text{and} \quad \beta = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{B}_n \delta^n. \quad (5)$$

In material 2, i.e., in the region  $z \geq 0$ , one can follow Ref. 6 and use  $\delta = [\varepsilon_{\pm} - U(z)]/(E_g + \Delta)$ . In the present CdTe/InSb heterojunction, the expectation value of  $\delta$  in the first subband is estimated to be  $\sim 0.025$  and terms of the order of  $\delta^2$  will be neglected. By taking only the leading order terms, we obtain  $m^* = (\hbar^2/P^2) E_g(E_g + \Delta)/(3E_g + 2\Delta)$  and  $\beta^* = (\hbar^2/2m^*) \Delta/(3E_g + 2\Delta)$ , in zeroth order, whereas the Rashba coupling parameter ( $\alpha^*$ ) appears only in first order, and is given by

$$\alpha^* = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Delta}{E_g} \frac{2E_g + \Delta}{(E_g + \Delta)(3E_g + 2\Delta)} e\mathcal{E}, \quad (6)$$

as first obtained in Ref. 6.

In the barrier region instead, i.e., for  $z \leq 0$ , and since the energies of interest lay inside the gap, it is convenient to

follow Ref. 10 and introduce renormalized barrier parameters  $\bar{m}$ ,  $\bar{\beta}$ , and  $\bar{\alpha}$ , which include nonparabolicity corrections to the corresponding band-edge parameters, being though independent of the energy. The same procedure used in Ref. 10 with a  $4 \times 4$   $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  model (without spin-orbit interaction) is followed here, now with the  $8 \times 8$  Kane model and we obtain:

$$\bar{m} = m^* \frac{(1 - v_0/E_g)[1 - v_0/(E_g + \Delta)]}{1 - v_0/(E_g + 2\Delta/3)}, \quad (7)$$

$$\bar{\beta} = \beta^* \frac{1}{(1 - v_0/E_g)[1 - v_0/(E_g + \Delta)]}, \quad (8)$$

and

$$\bar{\alpha} = \alpha^* \frac{1 - v_0/(E_g + \Delta/2)}{(1 - v_0/E_g)^2 [1 - v_0/(E_g + \Delta)]^2}. \quad (9)$$

Note that, as expected, they reduce exactly to their corresponding band-edge values,  $m^*$ ,  $\beta^*$ , and  $\alpha^*$ , as the barrier height  $v_0$  goes to zero.

Therefore, to leading order in the expansions, the effective Hamiltonian (1) is

$$H_{\text{eff}\pm} = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\hbar^2}{2\bar{m}} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right) + v_0 + e\mathcal{E}z \mp \bar{\alpha}k_{\parallel}, & z \leq 0 \\ \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right) - a \frac{[\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right)]^2}{E_g + \Delta} + e\mathcal{E}z \mp \alpha^*k_{\parallel}, & z \geq 0, \end{array} \right\}, \quad (10)$$

where the nonparabolicity constant

$$a = \frac{2(E_g + \Delta)^2 + E_g^2}{E_g(3E_g + 2\Delta)}. \quad (11)$$

In this form, for the calculation of the first subbands,  $H_{\text{eff}\pm}$  is seen to keep all the physics and most of the accuracy of the Kane model, but in a simple single-band form (not dependent on  $\varepsilon_{\pm}$ ) and therefore amenable to a variational solution. The boundary condition (4) is now given by

$$-\frac{\hbar^2}{2\bar{m}} \frac{d}{dz} \Psi_{1\pm} \mp \bar{\beta}k_{\parallel} \Psi_{1\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d}{dz} \Psi_{2\pm} \mp \beta^*k_{\parallel} \Psi_{2\pm}. \quad (12)$$

Note that slightly different perturbation expansions are used in each side of the interface, and that our results are correct only to the leading order in each side. Accordingly, the boundary conditions in Eq. (4) are, here also, satisfied only to this approximation. The model band parameters are listed in Table I. For  $z \geq 0$ , they are those of the well material:  $m^* = m^{*(2)}$ ,  $E_g = E_g^{(2)}$ , and  $\Delta = \Delta^{(2)}$ . For  $z \leq 0$ , corresponding to the barrier,  $E_g = E_g^{(1)}$  and  $\Delta = \Delta^{(1)}$ , while  $m^* = m^{*(1)} = (\hbar^2/P^2) E_g^{(1)}(E_g^{(1)} + \Delta^{(1)})/(3E_g^{(1)} + 2\Delta^{(1)})$ , used in the calculation of  $\bar{m}$ ,  $\bar{\alpha}$ , and  $\bar{\beta}$ , is obtained with the same value of  $P$  determined by  $m^{*(2)}$ . Finally, the band offset or barrier height is  $v_0 = E_c^{(1)} - E_c^{(2)}$  and  $E_c^{(2)} = 0$  we set as the energy origin, in the figures.

### III. SPIN-DEPENDENT VARIATIONAL APPROACH

Due to the above boundary conditions, as opposed to the infinite barrier approximation,<sup>6</sup> the trial functions of a variational solution must be spin dependent when there is barrier penetration, and the eigenenergies will be given by

$$\varepsilon_{\pm}(k_{\parallel}) = \langle \Psi_{\pm} | H_{\text{eff}\pm} | \Psi_{\pm} \rangle = \langle H_{\text{eff}\pm} \rangle_{\pm}. \quad (13)$$

The effective Hamiltonian (10) can be written as a sum of four different terms,  $H_{\text{eff}\pm} = \sum_{i=1}^4 H_{\text{eff}\pm}^{(i)}$ , so to have

$$\varepsilon_{\pm}(k_{\parallel}) = T_{\pm} + T_{np\pm} + V_{\pm} + V_{so\pm} \quad (14)$$

where

$$T_{\pm} = \left\langle \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{\bar{m}^{(1)}} \theta(-z) + \frac{1}{m^{*(2)}} \theta(z) \right) \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right) \right\rangle_{\pm}, \quad (15)$$

$$T_{np\pm} = \left\langle -a \frac{[\frac{\hbar^2}{2m^{*(2)}} \left( -\frac{d^2}{dz^2} + k_{\parallel}^2 \right)]^2}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}} \theta(z) \right\rangle_{\pm}, \quad (16)$$

$$V_{\pm} = \langle e\mathcal{E}z + v_0 \theta(-z) \rangle_{\pm}, \quad (17)$$

and

$$V_{so\pm} = \langle \mp(\bar{\alpha}\theta(-z) + \alpha^*\theta(z))k_{\parallel} \rangle_{\pm}. \quad (18)$$

These contributions can be further separated into barrier and well components, i.e.,  $T_{\pm} = \bar{T}_{\pm} + T_{\pm}^*$ , and similarly for  $V$  and  $V_{so}$ .

TABLE I. Heterojunction bulk band parameters (Refs. 13–15) used in the present calculations.

	$E_g^{(1)}$ (eV)	$\Delta^{(1)}$ (eV)	$v_0$ (meV)	$E_g^{(2)}$ (eV)	$\Delta^{(2)}$ (eV)	$m^{*(2)}(m_e)$	$\varepsilon_{sc}$
CdTe/InSb	1.590	0.800	550	0.240	0.810	0.015	16.8
Insulator/InAs	...	...	$\infty$	0.418	0.380	0.023	12.2
InP/In <sub>0.53</sub> Ga <sub>0.47</sub> As	1.423	0.107	250	0.813	0.326	0.041	13.1
In <sub>0.52</sub> Al <sub>0.48</sub> As/In <sub>0.53</sub> Ga <sub>0.47</sub> As	1.513	0.309	500	0.813	0.326	0.041	13.1
Al <sub>0.3</sub> Ga <sub>0.7</sub> As/GaAs	1.893	0.334	269	1.519	0.340	0.067	12.9

For a given electron density  $n_s$ , the trial function  $\Psi_{\pm}$  or its variational parameter is determined by minimizing the total energy (sum over all the electrons). Assuming all the electrons in the first subband, such minimization of the total energy in the Hartree approximation for the electron-electron (e-e) interaction corresponds to minimizing  $\tilde{\varepsilon}_{\pm}$ , equal to the above single particle energy  $\varepsilon_{\pm}$  except for the substitution in  $V_{\pm}$  of the electric field  $\mathcal{E}$  by  $\mathcal{E}/2$  due to the double count in the e-e interaction.<sup>11</sup>

From the obtained energy splitting ( $\delta\varepsilon = \langle H_{\text{eff}+} \rangle_+ - \langle H_{\text{eff}-} \rangle_-$ ) of the states at the Fermi level, we define an effective Rashba coupling parameter by setting

$$|\delta\varepsilon| = 2\alpha_{\text{eff}}k_F. \quad (19)$$

In the present scheme, the Rashba splitting is then given as a sum of different contributions, i.e.,  $\delta\varepsilon = \sum_i \delta\varepsilon_i$ , with

$$\delta\varepsilon_i = \langle H_{\text{eff}+}^{(i)} \rangle_+ - \langle H_{\text{eff}-}^{(i)} \rangle_-, \quad (20)$$

where  $i$  labels the four contributions of Eqs. (15)–(18).

### A. Spin-dependent trial functions

Calculations based on the celebrated Fang-Howard variational function have been intensively applied to the study of semiconductor heterojunctions.<sup>11–13</sup> We here introduce modified spin-dependent Fang-Howard trial functions to describe Rashba split 2DEGs in III–V semiconductor heterojunctions. They satisfy the above boundary conditions, allow for a simple lowest subband solution, including the Rashba spin-orbit coupling, band nonparabolicity and barrier penetration effects, and read:

$$\Psi_{\pm}(z) = \begin{cases} \Psi_{1\pm} = A_{\pm}e^{k_b z/2}, & z \leq 0 \\ \Psi_{2\pm} = B_{\pm}(z + c_{\pm})e^{-bz/2}, & z \geq 0 \end{cases} \quad (21)$$

where  $k_b = 2\sqrt{2\bar{m}^{(1)}v_0/\hbar^2}$  and  $b$  is the variational parameter determined by minimizing the total energy.

As can be straightforwardly verified, the boundary condition (12) implies that

$$A_{\pm} = B_{\pm}c_{\pm} \quad (22)$$

and

$$c_{\pm} = \frac{2}{b + \frac{m^{*(2)}}{\bar{m}^{(1)}}k_b \pm 4\frac{m^{*(2)}}{\hbar^2}(\tilde{\beta}^{(1)} - \beta^{*(2)})k_{\parallel}}, \quad (23)$$

which explicitly show the analytical coupling between the spin and the dynamic variable  $k_{\parallel}$  of the 2D electrons. From the normalization condition, we obtain

$$B_{\pm} = \sqrt{\frac{b^3/2}{1 + bc_{\pm} + b^2c_{\pm}^2(1 + b/k_b)/2}}. \quad (24)$$

The spin-dependent density of probability in the regions 1 and 2 are, respectively,  $\langle \Psi_{1\pm} | \Psi_{1\pm} \rangle = A_{\pm}^2/k_b$  and  $\langle \Psi_{2\pm} | \Psi_{2\pm} \rangle = B_{\pm}^2(2/b^3 + 2c_{\pm}/b^2 + c_{\pm}^2/b)$ . The Eqs. (22), (23), and (24) completely determine  $A_{\pm}$ ,  $B_{\pm}$ , and  $c_{\pm}$  in terms of  $b$  and  $k_b$ .

For the expectation value of the kinetic energy in the two sides of the interface, we obtain:

$$\bar{T}_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2\bar{m}^{(1)}} \left( -\frac{A_{\pm}^2 k_b}{4} + \langle \Psi_{1\pm} | \Psi_{1\pm} \rangle k_{\parallel}^2 \right) \quad (25)$$

and

$$T_{\pm}^* = \frac{\hbar^2}{2m^{*(2)}} \left[ B_{\pm}^2 \left( \frac{1}{2b} + \frac{c_{\pm}}{2} - \frac{1}{4}bc_{\pm}^2 \right) + \langle \Psi_{2\pm} | \Psi_{2\pm} \rangle k_{\parallel}^2 \right]. \quad (26)$$

The nonparabolicity correction in the well region becomes

$$T_{np\pm}^* = -\frac{a}{E_g^{(2)} + \Delta^{(2)}} \frac{\hbar^4}{4(m^{*(2)})^2} \left[ \frac{B_{\pm}^2 b}{8} \left( \frac{1}{2}c_{\pm}^2 b^2 - 3c_{\pm} b - 3 \right) + B_{\pm}^2 \left( \frac{1}{b} + c_{\pm} - \frac{bc_{\pm}^2}{2} \right) k_{\parallel}^2 + \langle \Psi_{2\pm} | \Psi_{2\pm} \rangle k_{\parallel}^4 \right]. \quad (27)$$

For the expectation values of the potential energy we obtain:

$$\bar{V}_{\pm} = \frac{A_{\pm}^2}{k_b} \left( v_0 - \frac{e\mathcal{E}}{k_b} \right) \quad (28)$$

and

$$V_{\pm}^* = e\mathcal{E}B_{\pm}^2 \left( \frac{6}{b^4} + 4\frac{c_{\pm}}{b^3} + \frac{c_{\pm}^2}{b^2} \right). \quad (29)$$

Finally, the components of the direct spin-orbit coupling energy read are

$$\bar{V}_{so\pm} = \mp \bar{\alpha} \langle \Psi_{1\pm} | \Psi_{1\pm} \rangle k_{\parallel}, \quad (30)$$

$$V_{so\pm}^* = \mp \alpha^* \langle \Psi_{2\pm} | \Psi_{2\pm} \rangle k_{\parallel}. \quad (31)$$

## IV. RESULTS FOR DIFFERENT III–V HETEROJUNCTIONS

The upper inset in Fig. 1 shows the small envelope function amplitude and derivative discontinuity at the interface, obtained for electrons with opposite spins. However,



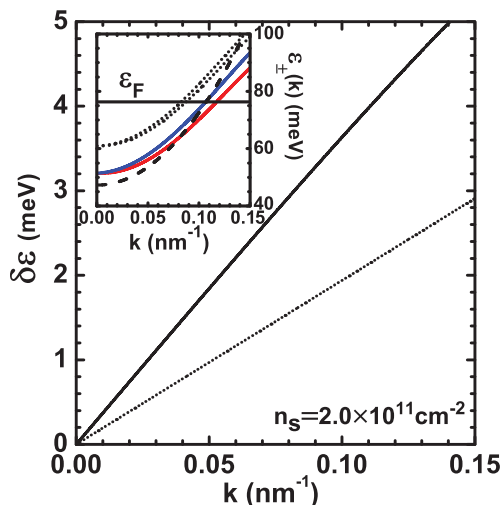


FIG. 2. (Color online) Rashba splitting as a function of the parallel wave vector. Inset shows the spin-split conduction subband dispersion relations and parabolic approximation (dashed line) for a CdTe/InSb heterojunction. The dotted lines show the limiting case of insulator/InSb.

as shown in the lower inset, these small differences have a considerable effect in the corresponding energy levels and in the Rashba splitting (the dotted lines show the results for an infinite barrier). For the heterojunction in Fig. 1, we obtain  $b = 0.14 \text{ nm}^{-1}$  independent of  $k_{\parallel}$  and spin. Figure 2 shows the corresponding Rashba splitting as a function of the parallel wavevector, and the inset shows the subband dispersion relations, where the dashed line represents the parabolic spin-independent limit. We see that for the present CdTe/InSb heterojunction, barrier penetration is predicted to be responsible for an increase close to 85% in the Rashba splitting relative to the infinite barrier approximation.

Such strong barrier penetration effect can be analyzed by decomposing the Rashba splitting into its different contributions, as plotted in Fig. 3 for the heterojunction of Fig. 1. It is interesting to note that all the different terms of the effective Hamiltonian do contribute to the total spin splitting. In particular, we also see that the contributions from  $\bar{T}$  and  $T^*$  are the main ones responsible for the above-mentioned increase in the Rashba splitting, as the contributions of  $\bar{V}$  and  $V^*$  nearly cancel each other and those of  $\bar{V}_{so}$  and  $T_{np}^*$  are negligible. For CdTe/InSb heterojunctions with  $n_s = 2.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , for example, we obtain a Rashba splitting at the Fermi level  $\delta\varepsilon = 4.1 \text{ meV}$ , which, in meV, is the sum of  $\delta T^* = 0.7$ ,  $\delta\bar{T} = 1.0$ ,  $\delta T_{np}^* = -0.1$ ,  $\delta V^* = 1.3$ ,  $\delta\bar{V} = -1.0$ ,  $\delta V_{so}^* = 2.2$ , and  $\delta\bar{V}_{so} \sim 0$ . For an infinite barrier, only  $\delta V_{so}^*$  remains; all the other contributions go to zero. In this limit, the envelope function becomes independent of spin, and no Rashba splitting contribution is obtained from the kinetic or potential energy terms, so that we get  $\alpha_{\text{eff}} = \alpha^*$ . Therefore, for  $v_0 \rightarrow \infty$ , we have:  $k_b \rightarrow \infty$ ,  $c_{\pm} \rightarrow 0$ ,  $\langle v_0 \theta(-z) \rangle_{\pm} \rightarrow 0$ ,  $B_{\pm}^2 \rightarrow b^3/2$ , and  $\langle z \rangle_{\pm} \rightarrow 3/b$ , which substituted in the above expressions for  $\varepsilon(k_{\parallel})$  lead to the known infinite barrier results of Ref. 6. It is also interesting to note in Fig. 3 how the different contributions vary with the electron density. We can see, for instance, that the usual or direct Rashba spin-orbit term in the effective

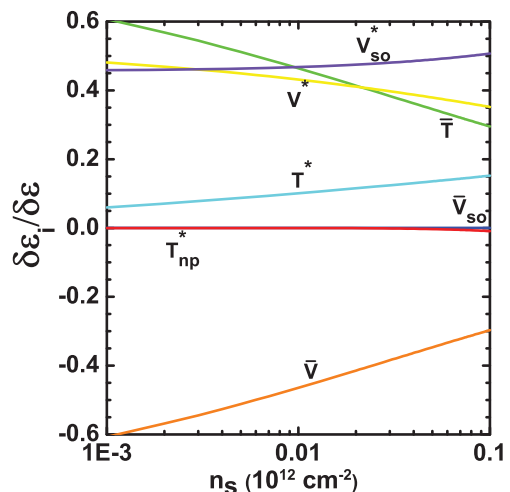


FIG. 3. (Color online) Partial contributions to the Rashba splitting as a function of the 2DEG carrier concentration in a CdTe/InSb heterojunction.

Hamiltonian (i.e.,  $V_{so}^*$ ) dominates the Rashba effect only in CdTe/InSb inversion layers with more than  $10^{10} \text{ e/cm}^2$ . At lower densities, it is the barrier penetration kinetic energy term that dominates the Rashba effect in this system. This is a direct result of the spin-dependent boundary conditions [Eq. (12)].

#### A. Spin-split subband population

The Rashba coupling parameter at the Fermi level ( $\varepsilon_F$ ) can be estimated as  $\alpha_{\text{eff}} = |\varepsilon_+(k_F) - \varepsilon_-(k_F)|/2k_F$ , with  $k_F = (k_+ + k_-)/2$  and  $k_{\pm}$  determined from  $\varepsilon_F = \varepsilon_+(k_+) = \varepsilon_-(k_-)$ . However, it is easier and usual to experimentally study the Rashba effect by measuring the difference in the split subband populations, directly from the beating pattern of the SdH oscillations. The populations  $n_-$  and  $n_+$  in each Rashba split subband, with  $n_+ + n_- = n_s$ , are simply given by

$$n_{\pm} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} \theta[\varepsilon_F - \varepsilon_{\pm}(k)] = \frac{k_{\pm}^2}{4\pi}. \quad (32)$$

The results for the population difference in the two split subbands (some times referred as the density spin polarization) for the different III-V heterojunctions are shown in Fig. 4(a) as a function of  $n_s$ . The parameters used are listed in Table I. Figure 4(b) shows the corresponding effective Rashba coupling parameter  $\alpha_{\text{eff}}$ . By comparing the InGaAs results which correspond to different barriers, we see that the larger penetration in the smaller InP barrier for the electrons leads to a considerable increase in the Rashba splitting, as compared to the InAlAs barrier. Figure 4 also clearly shows the well-known trend to larger splittings in heterojunctions formed by materials with smaller energy gaps. These results agree well with those obtained by numerical integration of the multiband effective Schrodinger equation and with available experimental data.<sup>5,16-19</sup> As expected, such agreement gets worse as  $n_s$  increases and the present scheme starts to overestimate the splitting. Anyway, before a detailed comparison with experiment is carried out, a Dresselhaus or bulk spin-orbit term must be added, specially for heterojunctions of large band gap materials, and for noncommon atom interfaces, the interface

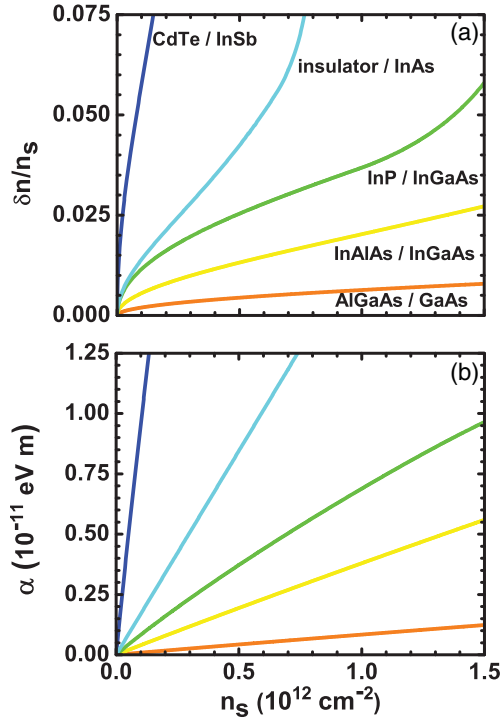


FIG. 4. (Color online) Spin-split subband population difference (a) and the resulting effective Rashba coupling parameter (b), as a function of the carrier density  $n_s$  and for different III–V heterojunctions.

inversion asymmetry contribution<sup>20</sup> must also be taken into account.

## V. CONCLUSIONS

We have performed a variational analysis of the Rashba spin-orbit splitting in III–V semiconductor inversion layers. The Rashba coupling parameter and the corresponding subband population difference, as experimentally determined from the beating pattern of the SdH oscillations, are calculated for inversion layers at CdTe/InSb, insulator/InAs, InP/InGaAs, InAlAs/InGaAs, and AlGaAs/GaAs heterojunctions. The main properties of the Rashba effect are shown to be well reproduced by the theory. It is also shown that the separate contributions to the Rashba effect in III–V heterojunctions can be studied with accurate analytical expressions. In particular, the explicit dependence on the different heterostructure and bulk band parameters can be very useful in device development and optimization. The present results also help to clarify the controversial role of the interface and barrier penetration. It is clearly seen, for example, the increasing importance of the spin-dependent boundary conditions as the 2DEG electron density is reduced. In CdTe/InSb inversion layers, for example, the usual (or direct) Rashba spin-orbit term in the effective Hamiltonian is seen to dominate the Rashba effect only for  $n_s > 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ . Finally, it is worth mentioning that the theory details presented here, as well as the intermediate analytical results for the energy integrals [Eqs. (25)–(31)] and the instructions for correct use of the parameters, allow the present theory to be easily applied in the study of the Rashba effect in any other III–V semiconductor heterojunction.

## ACKNOWLEDGMENTS

The authors wish to thank the Brazilian agencies CNPq and FAPESB for financial support, and H. Closs for the revision.

\*erasmo@las.inpe.br

<sup>1</sup>D. Awschalom and N. Samarth, *Physics* **2**, 50 (2009).

<sup>2</sup>I. Zutic, J. Fabian, and S. D. Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).

<sup>3</sup>U. Ekenberg and D. M. Gvozdic, *Phys. Rev. B* **78**, 205317 (2008).

<sup>4</sup>R. Winkler, in *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer Tracts in Modern Physics Vol. 191 (Springer, Berlin, 2003).

<sup>5</sup>M. A. Toloza Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **79**, 241305(R) (2009).

<sup>6</sup>E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **50**, 8523 (1994).

<sup>7</sup>G. Marques and L. Sham, *Surf. Sci.* **113**, 131 (1982).

<sup>8</sup>L. G. Gerchikov and A. V. Subashiev, *Sov. Phys. Semicond.* **26**, 73 (1992).

<sup>9</sup>D. G. Rothe, R. W. Reinthaler, C.-X. Liu, L. W. Molenkamp, S.-C. Zhang, and E. M. Hankiewicz, *New J. Phys.* **12**, 065012 (2010).

<sup>10</sup>G. Brozak, E. A. de Andrada e Silva, L. J. Sham, F. DeRosa, P. Miceli, S. A. Scharwz, J. P. Harbison, L. T. Flores, and S. J. Allen, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 471 (1990).

<sup>11</sup>G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les editions de physique, Les Ulis, 1990).

<sup>12</sup>F. Fang and W. Howard, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 18 (1966).

<sup>13</sup>J. Davies, *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: An Introduction* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).

<sup>14</sup>J.-M. Jancu, R. Scholz, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **72**, 193201 (2005).

<sup>15</sup>*Landolt-Bornstein New Series*, edited by O. Madelung (Springer, Berlin, 1987), Vol. III/22a.

<sup>16</sup>E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **55**, 16293 (1997).

<sup>17</sup>T. Matsuyama, R. Kursten, C. Meißner, and U. Merkt, *Phys. Rev. B* **61**, 15588 (2000).

<sup>18</sup>C. Schierholz, T. Matsuyama, U. Merkt, and G. Meier, *Phys. Rev. B* **70**, 233311 (2004).

<sup>19</sup>C. L. Yang, H. T. He, L. Ding, L. J. Cui, Y. P. Zeng, J. N. Wang, and W. K. Ge, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 186605 (2006).

<sup>20</sup>L. Vervoort, R. Ferreira, and P. Voisin, *Phys. Rev. B* **56**, R12744 (1997).

## Spin-orbit interaction strength and anisotropy in III-V semiconductor heterojunctions

M. A. Toloza Sandoval,<sup>1</sup> A. Ferreira da Silva,<sup>1</sup> E. A. de Andrada e Silva,<sup>2</sup> and G. C. La Rocca<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia 40210-340, Salvador, Bahia, Brazil*

<sup>2</sup>*Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, Caixa Postale 515, 12201-970 São José dos Campos, São Paulo, Brazil*

<sup>3</sup>*Scuola Normale Superiore and CNISM, Piazza dei Cavalieri 7, I-56126 Pisa, Italy*

(Received 25 October 2012; revised manuscript received 27 December 2012; published 13 February 2013)

The spin-orbit interaction strength for electrons in III-V semiconductor heterojunctions and the corresponding in-plane anisotropy are theoretically studied, considering Rashba and Dresselhaus contributions. Starting from a variational solution of Kane's effective Hamiltonian for the Rashba-split subbands, the total spin-orbit splitting at the Fermi level of the two-dimensional electron gas in III-V heterojunctions is calculated analytically, as a function of the electron density and wave-vector direction, by adding the Dresselhaus contribution within quasidegenerate first-order perturbation theory. Available GaAs and InGaAs experimental data are discussed. Effects of the barrier penetration are identified, and the spin-orbit anisotropy is shown to be determined by more than one parameter, even in the small- $k$  limit, contrary to the commonly used  $\alpha/\beta$  (where  $\alpha$  is the Rashba and  $\beta$  the Dresselhaus interaction) single-parameter picture.

DOI: [10.1103/PhysRevB.87.081304](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.081304)

PACS number(s): 73.20.-r, 75.70.Tj, 73.22.-f

With the goal of further pushing the limits of data storage and processing devices, research in semiconductor spintronics has been largely based on the Datta-Das spin transistor.<sup>1,2</sup> The functioning of such an ideal device is based on gate control of the spin precession of the conducting electrons through the Rashba [or structure inversion asymmetry (SIA)] spin-orbit (SO) coupling in semiconductor heterojunctions. However, despite recent and promising progress,<sup>3,4</sup> we are still far from a real device. In particular, the SO interaction in an active III-V heterojunction is still not well known, especially regarding its in-plane anisotropy, which is mainly due to corrections from the intrinsic or bulk inversion asymmetry (BIA) SO contribution (the Dresselhaus contribution). In this Rapid Communication, an accurate and particularly transparent solution for the spin-orbit splitting in the conducting electron states in III-V semiconductor heterojunctions is presented. It includes both Rashba and Dresselhaus contributions and is shown to be in reasonable agreement with experiment.

This anisotropy is special because it can also be tuned with the gate voltage so as to make, for example, the SO splitting at the Fermi energy negligible for electrons moving along given in-plane directions, suppressing the relaxation of their spins and forming the so-called persistent spin helix modes, as recently observed.<sup>5,6</sup> Such anisotropy can be seen to be due to the interplay (or interference) between the two contributions mentioned above. For instance, it is known that in III-V heterojunctions grown along the [001] crystallographic direction, the splitting is maximum for electrons traveling along the direction [110] (constructive interference) and minimum along [1 $\bar{1}$ 0] (destructive interference).<sup>7-10</sup> However, this picture with a simple twofold rotational symmetry (with respect to the direction of  $\vec{k}_{\parallel}$ ) is exact only in the linear- $k_{\parallel}$  and infinite-barrier approximation.<sup>7</sup> In this approximation, the in-plane SO anisotropy is determined by a single parameter, the so-called  $\alpha/\beta$  ratio (i.e., the ratio of the Rashba to the Dresselhaus interaction), and the above mentioned zero-splitting situation occurs along [1 $\bar{1}$ 0] when  $\alpha/\beta = 1$ , corresponding to Rashba and Dresselhaus SO terms with the same strength.<sup>7</sup> However, as shown here, barrier penetration effects as well as higher-order terms in  $k_{\parallel}$  cannot be neglected

in the determination of the SO in-plane symmetry of actual III-V semiconductor heterojunctions. Including these effects, the total SO splitting in III-V heterojunctions is calculated here in a particularly transparent and accurate way. Specific results for AlGaAs/GaAs and InAlAs/InGaAs structures are shown to be in much better agreement with the experimental data than the simplified and commonly used  $\alpha/\beta$  parametrization.

We start from a recently proposed spin-resolved variational solution for the Rashba-split electronic subbands.<sup>11,12</sup> Within the standard envelope function approximation based on the Kane  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  model for the bulk, the envelope function of such split subbands satisfies

$$H_R |\Psi_{\uparrow\downarrow}\rangle = \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R(k_{\parallel}) |\Psi_{\uparrow\downarrow}\rangle, \quad (1)$$

where the effective Hamiltonian  $H_R$  includes penetration and renormalized parameters in the barrier, as well as band non-parabolicity in the well;<sup>11,12</sup> and  $|\Psi_{\uparrow\downarrow}\rangle = e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} |f_{\uparrow\downarrow}(z)\rangle \chi_{\uparrow\downarrow}(\vartheta)$  are the variational envelope functions for the electrons with spins up and down along the direction perpendicular to  $\vec{k}_{\parallel} = (k_{\parallel}, \vartheta)$ . The spin part

$$\chi_{\uparrow}(\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos(\vartheta/2) \\ -i \sin(\vartheta/2) \end{pmatrix}, \quad \chi_{\downarrow}(\vartheta) = \begin{pmatrix} -i \sin(\vartheta/2) \\ \cos(\vartheta/2) \end{pmatrix} \quad (2)$$

depends only on the  $\vec{k}_{\parallel}$  direction  $\vartheta$  (the angle it makes with the  $x$  axis; note that for simplicity the spin is quantized along the  $y$  direction), while the scalar part  $|f_{\uparrow\downarrow}(z)\rangle$  depends only on its modulus  $k_{\parallel}$ . With the interface at  $z = 0$ , the trial functions for such an envelope function read

$$\langle z | f_{\uparrow\downarrow} \rangle = \begin{cases} A_{\uparrow\downarrow} e^{k_b z/2}, & z \leq 0, \\ B_{\uparrow\downarrow} (z + c_{\uparrow\downarrow}) e^{-b z/2}, & z \geq 0, \end{cases} \quad (3)$$

where the variational parameter  $b$  (determined by minimizing the total energy) and the parameters  $A$ ,  $B$ , and  $c$  (determined by the boundary and normalization conditions) do not depend on  $\vartheta$ . The details of such a variational solution are given in Ref. 12. The resulting spin splitting

$$\Delta_R(k_{\parallel}) = |\varepsilon_{\uparrow}^R(k_{\parallel}) - \varepsilon_{\downarrow}^R(k_{\parallel})| \quad (4)$$

does not depend on the direction of  $\vec{k}_{\parallel}$  and represents the usual Rashba splitting, which in the linear approximation is commonly written as  $\Delta_R = 2\alpha k_{\parallel}$ .<sup>13</sup>

The effects of the Dresselhaus bulk contribution<sup>14</sup> are due to remote bands not included in the Kane model.<sup>15</sup> They can be studied by treating within quasidegenerate first-order perturbation theory the additional contribution  $H_D$  to the conduction band effective Hamiltonian,<sup>8</sup> which is given by

$$H_D = \gamma [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)], \quad (5)$$

where  $x$ ,  $y$ , and  $z$  correspond to the cubic crystallographic directions and  $\vec{\sigma}$  to the Pauli matrix vector. The total Hamiltonian  $H = H_R + H_D$  is then written in the basis set formed with the above unperturbed eigenstates, i.e.,

$$H = \begin{pmatrix} H_{\uparrow\uparrow} & H_{\uparrow\downarrow} \\ H_{\downarrow\uparrow} & H_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix},$$

where  $H_{\uparrow\uparrow} = \langle \Psi_{\uparrow} | H | \Psi_{\uparrow} \rangle$ ,  $H_{\downarrow\downarrow} = \langle \Psi_{\downarrow} | H | \Psi_{\downarrow} \rangle$ , and so on, given by

$$H_{\uparrow\uparrow} = \varepsilon_{\uparrow}^R(k_{\parallel}) + \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} \sin(2\vartheta) k_{\parallel} - \frac{1}{2} \langle \gamma(z) \rangle_{\uparrow\uparrow} \sin(2\vartheta) k_{\parallel}^3, \quad (6)$$

$$H_{\downarrow\downarrow} = \varepsilon_{\downarrow}^R(k_{\parallel}) - \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\downarrow\downarrow} \sin(2\vartheta) k_{\parallel} + \frac{1}{2} \langle \gamma(z) \rangle_{\downarrow\downarrow} \sin(2\vartheta) k_{\parallel}^3, \quad (7)$$

and

$$H_{\uparrow\downarrow} = i \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\downarrow} \cos(2\vartheta) k_{\parallel} = H_{\downarrow\uparrow}^*; \quad (8)$$

with  $\langle \gamma(z) \rangle_{\uparrow\uparrow} = \langle f_{\uparrow} | \gamma(z) | f_{\uparrow} \rangle$ ,  $\langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} = \langle f_{\uparrow} | (-id/dz) \gamma(z) (-id/dz) | f_{\uparrow} \rangle$ , and so on (note that the bulk  $\gamma$  parameter varies along the growth direction  $z$  and it is then necessary to symmetrize these integrals).<sup>8</sup> Then, after straightforward diagonalization, we obtain the following perturbed eigenvalues:

$$\varepsilon_{\pm}(k_{\parallel}, \vartheta) = \bar{\varepsilon}(k_{\parallel}, \vartheta) \pm \frac{1}{2} \Delta_s(k_{\parallel}, \vartheta) \quad (9)$$

where the spin-independent part reads

$$\bar{\varepsilon}(k_{\parallel}, \vartheta) = \frac{1}{2} \{ \varepsilon_{\uparrow}^R(k_{\parallel}) + \varepsilon_{\downarrow}^R(k_{\parallel}) + [ \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\downarrow\downarrow} - \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} + \frac{1}{2} [ \langle \gamma(z) \rangle_{\uparrow\uparrow} - \langle \gamma(z) \rangle_{\downarrow\downarrow} ] k_{\parallel}^2 ] k_{\parallel} \sin 2\vartheta \} \quad (10)$$

and the SO splitting is given by

$$\Delta_s(k_{\parallel}, \vartheta) = \sqrt{ \Delta_R(k_{\parallel}) - [ \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} + \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\downarrow\downarrow} - \frac{1}{2} [ \langle \gamma(z) \rangle_{\uparrow\uparrow} + \langle \gamma(z) \rangle_{\downarrow\downarrow} ] k_{\parallel}^2 ] k_{\parallel} \sin 2\vartheta }^2 + 4 \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\downarrow}^2 k_{\parallel}^2 \cos^2 2\vartheta. \quad (11)$$

In the infinite-barrier limit, this expression for the SO splitting exactly reproduces Eq. (19) in Ref. 16, extending it to the general finite-barrier case. Barrier penetration leads to corrections in the unperturbed Rashba-split subbands<sup>12</sup> and, in combination with the Dresselhaus contribution, is responsible for the anisotropy in  $\bar{\varepsilon}$  and for the corrections in the total spin-splitting anisotropy, given by the allowed different expectation values (or matrix elements) designated as  $\langle \rangle_{s,s'}$ . Note that the  $\pm$  sign above stands for spin up or down along the polarization direction of the perturbed eigenstates, which are given by

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{|H_{\uparrow\downarrow}\rangle}{\sqrt{|H_{\uparrow\downarrow}|^2 + (\varepsilon_{\pm} - H_{\uparrow\uparrow})^2}} \times \begin{pmatrix} 1 \\ H_{\uparrow\downarrow}^* (\varepsilon_{\pm} - H_{\uparrow\uparrow}) / |H_{\uparrow\downarrow}|^2 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Note also that  $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon_{\pm}(k_{\parallel}, \vartheta)$ , so that such spin polarization depends now on both the absolute value and the direction of  $\vec{k}_{\parallel}$ . In particular, for a fixed wave-vector direction, the spin polarization direction now changes with increasing  $k_{\parallel}$ .

From the above equations, one clearly sees that in general the heterojunction in-plane SO anisotropy cannot be described by a single parameter. It is easy to see that only in the infinite-barrier and small- $k_{\parallel}$  limit does the splitting obtained above reduce exactly to the commonly used expression  $\Delta_s(k_{\parallel}, \vartheta) = 2k_{\parallel} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta \sin 2\vartheta}$  where  $\beta = \gamma \langle k_z^2 \rangle$ ,  $\langle k_z^2 \rangle$  being the average momentum squared along the growth direction and  $\gamma$

the  $k^3$  bulk parameter for the well material [note that in this limit  $\langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} = \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\uparrow\downarrow} = \langle \gamma(z) k_z^2 \rangle_{\downarrow\downarrow} = \beta$ ].

In the much studied two-dimensional electron gas (2DEG) formed in AlGaAs/GaAs heterojunctions, such SO anisotropy is particularly evident. In Fig. 1, using a color scale, the obtained SO splitting for electrons in these structures (at the Fermi energy) is plotted as a function of the 2DEG electron density  $n_s$  and of the  $\vec{k}_F$  direction (low-temperature bulk parameters are used<sup>17,18</sup>). It is interesting to note that the  $\vec{k}$  direction with maximum splitting varies with  $n_s$ . We note

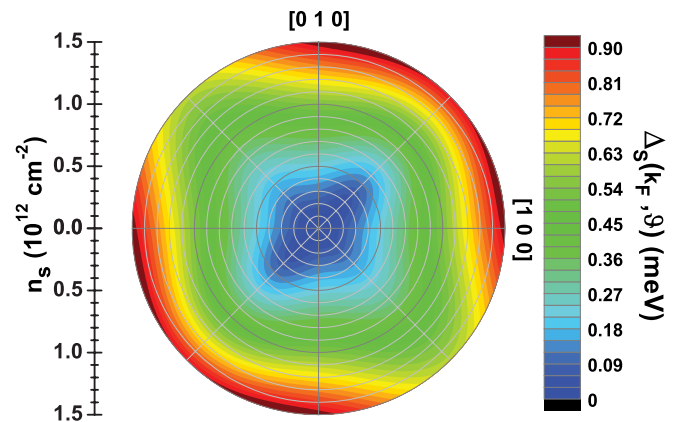


FIG. 1. (Color online) Total spin-orbit splitting (in color scale) at the Fermi level as a function of the 2DEG carrier concentration and Fermi wave-vector direction in an  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$  heterojunction.

also that even for small  $n_s$  (small  $k_{\parallel}$ ) the SO splitting in these structures does not present the above mentioned twofold symmetry determined only by  $\alpha/\beta$ . This is due to the barrier penetration and can be understood by recalling that, when one reduces the barrier height at the interface and at the same time decreases  $n_s$ , the confinement and SIA are decreased so that  $H_D$  (with fourfold symmetry) eventually dominates. Indeed, in the bulklike zero-barrier-height and very-small- $n_s$  limit, one has only the Dresselhaus SO term. For the same reason, even in narrow-gap-based heterojunctions  $H_D$  should not be neglected (as is usually done) when barrier penetration is considerable (in this respect, see also the discussion below about  $\alpha_{SdH}$ ).

Experimentally such anisotropy in GaAs heterojunctions has been most directly probed with the spin photocurrent<sup>9</sup> (SPC) and ballistic electron spin resonance<sup>10</sup> (BSR) techniques. Giglberger *et al.*<sup>9</sup> interpreted their SPC data on the SO anisotropy with the  $\alpha/\beta$  ratio and obtained values for this ratio equal to 7.6, 2.8, and 1.5 for the samples with  $n_s$  equal to  $1.1 \times 10^{11}$ ,  $1.3 \times 10^{11}$ , and  $1.8 \times 10^{11}$  cm<sup>-2</sup>, respectively. Instead, with BSR Frolov *et al.*,<sup>10</sup> also in an  $n_s = 1.1 \times 10^{11}$  cm<sup>-2</sup> AlGaAs/GaAs heterojunction, measured  $|\alpha - \beta| = (2 \pm 0.5) \times 10^{-13}$  eV m and  $|\alpha + \beta| = (0.6 \pm 0.2) \times 10^{-13}$  eV m, which correspond to  $\alpha/\beta$  in the 1.4–3.2 range. There are thus still large experimental uncertainties with respect to the SO anisotropy. Nevertheless, we can compare our results with these measurements by taking our total splitting  $\Delta_s$  for  $\vec{k}_F$  along the two explored directions ([110] and [1 $\bar{1}$ 0]) and writing them as

$$\Delta_s^{[110]} = |\alpha + \beta| k_F^{[110]} \quad \text{and} \quad \Delta_s^{[1\bar{1}0]} = |\alpha - \beta| k_F^{[1\bar{1}0]}. \quad (13)$$

From these relations we obtain effective  $\alpha/\beta$  ratios equal to 1.3, 1.2, and 1.1 for the same electron concentrations, i.e., for  $n_s = 1.1 \times 10^{11}$ ,  $1.3 \times 10^{11}$ , and  $1.8 \times 10^{11}$  cm<sup>-2</sup> respectively; which reproduce well the observed  $n_s$  dependence and are quantitatively much closer to the experimental data than other independent calculations of  $\alpha$  and  $\beta$  separately, in agreement with our conclusions with respect to the limitations of such  $\alpha/\beta$  parametrization.

The SO splitting in 2DEGs is also often studied using analysis of the beating pattern in Shubnikov–de Haas (SdH) oscillations, from which the electron density in the split subbands can be measured. The densities  $n_+$  and  $n_-$  (with  $n_+ + n_- = n_s$ ), in accord with the low-temperature occupation of each SO-split subband, can be easily calculated as

$$n_{\pm} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \Theta[\varepsilon_F - \varepsilon_{\pm}(k_{\parallel}, \vartheta)] k_{\parallel} dk_{\parallel} d\vartheta. \quad (14)$$

As is usually done in SdH data analysis, the difference  $\delta n = |n_+ - n_-|$  can then be used to obtain an effective Rashba

coupling parameter  $\alpha_{SdH}$  given by

$$\alpha_{SdH} = \delta n \frac{\hbar^2}{m^*} \sqrt{\frac{\pi}{2(n_s - \delta n)}}. \quad (15)$$

It is clear though that for the present III-V heterojunctions with SO anisotropy, this expression can give a measure of only the averaged splitting around the Fermi line, which will be an estimation of the usual Rashba coupling parameter  $\alpha$  only in structures with negligible Dresselhaus contribution, as for example in insulator/InAs and insulator/InSb heterojunctions. With an InGaAs-based heterojunction ( $n_s = 1.4 \times 10^{12}$  cm<sup>-2</sup>), Yang *et al.*<sup>19</sup> observed a very clear beating pattern in the SdH oscillations corresponding to  $\alpha_{SdH} = 0.63 \times 10^{-11}$  eV m. Using the dispersion relations in Eq. (9) we find, in reasonable agreement,  $\alpha_{SdH} = 0.55 \times 10^{-11}$  eV m. If we neglect  $H_D$ , instead of 0.55 we get 0.72, with a slightly larger deviation from the experimental value.

Another example is the InGaSb/InAlSb 2DEG spin-splitting data of Akabori *et al.*,<sup>20</sup> with a dominant Dresselhaus contribution in spite of its narrow gap, which can be understood with the barrier penetration effect discussed here. Finally, in agreement with our results there are also the recent data of Kohda *et al.*<sup>6</sup> on the 2DEG persistent spin helix modes in InAlAs/InGaAs quantum wells (QWs) (with considerable barrier penetration) that do not fit with the  $\alpha/\beta = 1$  condition. However, it is clear that further measurements are still necessary in order to determine the SO anisotropy in III-V QWs. In particular, the observation and analysis of anomalous beating patterns in the magneto-oscillations have been very useful in similar studies in the bulk,<sup>21</sup> and could be helpful in 2D systems as well, where they seem to have not been much explored yet.

In summary, we have seen that the present variational theory for the Rashba effect in semiconductor heterojunctions, with the Dresselhaus corrections included perturbatively, is able to give a good description of the spin-orbit anisotropy in III-V 2DEGs. The interpretation of the corresponding measurements has also been discussed, and the standard  $\alpha/\beta$  parametrization criticized. Effects of the barrier penetration in the 2DEG SO splitting and anisotropy have been identified. The anisotropy was shown to be determined in general by more than one parameter, even in the small- $k$  limit (as opposed to the commonly used single  $\alpha/\beta$  parameter). Reasonably good agreement with the available data indicates that the model calculation presented can be useful in the development of semiconductor spintronics.

The authors thank the Brazilian agencies CNPq, CAPES and FAPESB for financial support. E.A.A.S. is also grateful for the hospitality of the Scuola Normale Superiore di Pisa where part of this research was done.

<sup>1</sup>S. Datta and B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).

<sup>2</sup>I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).

<sup>3</sup>H. C. Koo, J. H. Kwon, J. Eom, J. Chang, S. H. Han, and M. Johnson, *Science* **325**, 1515 (2009).

<sup>4</sup>J. Wunderlich, B.-G. Park, A. C. Irvine, L. P. Zârbo, E. Rozkotová, P. Nemeč, V. Novák, J. Sinova, and T. Jungwirth, *Science* **330**, 6012 (2010).

<sup>5</sup>J. D. Koralek, C. P. Weber, J. Orenstein, B. A. Bernevig, S.-C. Zhang, S. Mack, and D. D. Awschalom, *Nature (London)* **458**, 610 (2009).

<sup>6</sup>M. Kohda, V. Lechner, Y. Kunihashi, T. Dollinger, P. Olbrich, C. Schönhuber, I. Caspers, V. V. Bel'kov, L. E. Golub, D. Weiss, K. Richter, J. Nitta, and S. D. Ganichev, *Phys. Rev. B* **86**, 081306(R) (2012).

<sup>7</sup>E. A. de Andrada e Silva, *Phys. Rev. B* **46**, 1921(R) (1992).

- <sup>8</sup>R. Eppenga and M. F. H. Schuurmans, *Phys. Rev. B* **37**, 10923(R) (1988).
- <sup>9</sup>S. Giglberger, L. E. Golub, V. V. Bel'kov, S. N. Danilov, D. Schuh, C. Gerl, F. Rohlfing, J. Stahl, W. Wegscheider, D. Weiss, W. Prettl, and S. D. Ganichev, *Phys. Rev. B* **75**, 035327 (2007).
- <sup>10</sup>S. M. Frolov, S. Lüscher, W. Yu, Y. Ren, J. A. Folk, and W. Wegscheider, *Nature (London)* **458**, 868 (2009); note however the different convention used for the crystallographic direction or parameter sign.
- <sup>11</sup>M. A. Toloza Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **79**, 241305(R) (2009).
- <sup>12</sup>M. A. Toloza Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **83**, 235315 (2011).
- <sup>13</sup>The Rashba splitting is exactly linear in  $k_{\parallel}$  only in the infinite-barrier and parabolic approximation (i.e., neglecting the  $\alpha$  energy dependence). However, in the GaAs/GaAlAs heterojunctions considered here, the deviation from the linear behavior is very small.
- <sup>14</sup>G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- <sup>15</sup>M. Cardona, N. E. Christensen, and G. Fasol, *Phys. Rev. B* **38**, 1806 (1988).
- <sup>16</sup>E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **50**, 8523 (1994).
- <sup>17</sup>*Intrinsic Properties of Group IV Elements and III-V, II-VI and I-VII Compounds*, edited by O. Madelung, Landolt-Börnstein, New Series, Group III, Vol. 22, Pt. a (Springer, Berlin, 1987).
- <sup>18</sup>J.-M. Jancu, R. Scholz, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **72**, 193201 (2005).
- <sup>19</sup>C. L. Yang, H. T. He, L. Ding, L. J. Cui, Y. P. Zeng, J. N. Wang, and W. K. Ge, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 186605 (2006).
- <sup>20</sup>M. Akabori, V. A. Guzenko, T. Sato, Th. Schapers, T. Suzuki, and S. Yamada, *Phys. Rev. B* **77**, 205320 (2008).
- <sup>21</sup>See, for instance, G. C. La Rocca, M. M. Miller, and S. Rodriguez, *Phys. Rev. B* **40**, 11723 (1989).

## Spinorbit Splitting Anisotropy in ntype InGaAs Inversion Layers

M. A. Toloza Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca

Citation: *AIP Conf. Proc.* **1416**, 91 (2011); doi: 10.1063/1.3671706

View online: <http://dx.doi.org/10.1063/1.3671706>

View Table of Contents: <http://proceedings.aip.org/dbt/dbt.jsp?KEY=APCPCS&Volume=1416&Issue=1>

Published by the [American Institute of Physics](#).

---

### Related Articles

Electronic structure of Al-doped ZnO transparent conductive thin films studied by x-ray absorption and emission spectroscopies

*J. Appl. Phys.* **110**, 103705 (2011)

Quantum anomalous Hall effect in doped ternary chalcogenide topological insulators TIBiTe<sub>2</sub> and TIBiSe<sub>2</sub>

*Appl. Phys. Lett.* **99**, 142502 (2011)

Nanoporous silicon: Surface effect and bandgap blueshift

*J. Appl. Phys.* **110**, 033507 (2011)

Investigation of thermoelectric properties of chalcogenide semiconductors from first principles

*J. Appl. Phys.* **109**, 123712 (2011)

Band structures of Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> and Cu<sub>2</sub>ZnSnSe<sub>4</sub> from many-body methods

*Appl. Phys. Lett.* **98**, 241915 (2011)

---

### Additional information on AIP Conf. Proc.

Journal Homepage: <http://proceedings.aip.org/>

Journal Information: [http://proceedings.aip.org/about/about\\_the\\_proceedings](http://proceedings.aip.org/about/about_the_proceedings)

Top downloads: [http://proceedings.aip.org/dbt/most\\_downloaded.jsp?KEY=APCPCS](http://proceedings.aip.org/dbt/most_downloaded.jsp?KEY=APCPCS)

Information for Authors: [http://proceedings.aip.org/authors/information\\_for\\_authors](http://proceedings.aip.org/authors/information_for_authors)

### ADVERTISEMENT



AIP Advances

*Submit Now*

Explore AIP's new  
open-access journal

- Article-level metrics now available
- Join the conversation! Rate & comment on articles

# Spin-orbit Splitting Anisotropy in n-type InGaAs Inversion Layers

M. A. Toloza Sandoval\*, A. Ferreira da Silva\*, E. A. de Andrada e Silva† and G. C. La Rocca\*\*

\**Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia 40210-340, Salvador, Bahia, Brazil*

†*Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, C.P. 515, 12201-970 São José dos Campos, São Paulo, Brazil*

\*\**Scuola Normale Superiore and CNISM, Piazza dei Cavalieri 7, I-56126 Pisa, Italy*

**Abstract.** Using a recently developed spin-dependent variational theory for the heterojunction electronic structure, we investigate the spin-orbit (SO) splitting in InGaAs two dimensional electron gases (2DEGs). We discuss in particular its anisotropy, determined by the relative strength of the Rashba and Dresselhaus SO terms. The envelope function formalism is employed analytically, using the 8-band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Kane model for the bulk and spin-dependent variational functions for the Rashba split conduction subbands. The Dresselhaus contribution is included via quasi-degenerate first order perturbation theory and the total spin-splitting at the Fermi level is calculated as a function of the Fermi wave-vector direction and of the 2DEG carrier density. Contrary to what it is usually assumed regarding InGaAs quantum wells, we find significant Dresselhaus contribution and corresponding spin-orbit anisotropy in the conduction subbands.

**Keywords:** spin-orbit interaction, inversion layers, InGaAs

**PACS:** 71.70.Ej, 71.15.Ap, 73.21.Fg, 85.75.?d

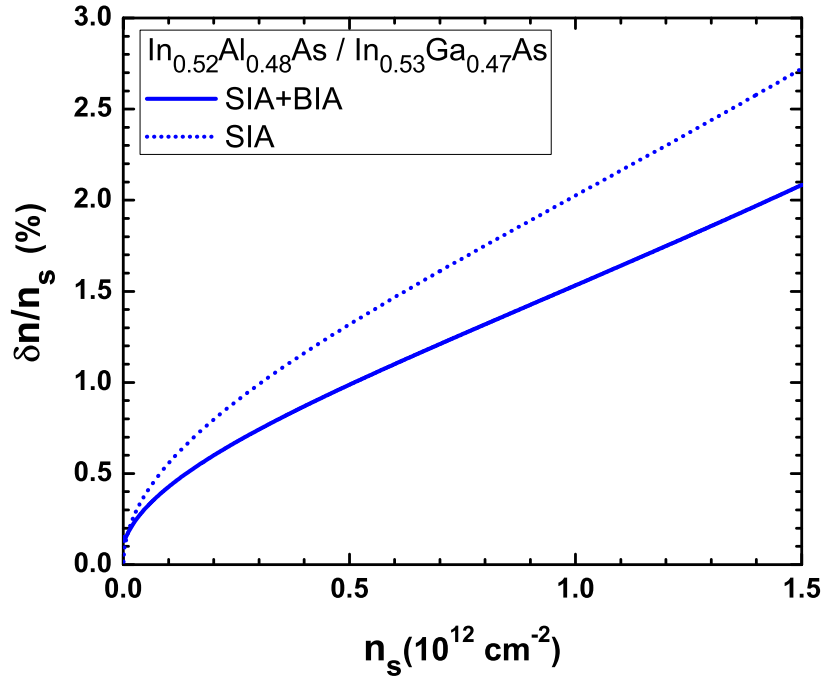
The spin-orbit (SO) coupling plays a fundamental role on the Datta and Das spin transistor determining the electron spin-precession in the conducting channels. In particular, its anisotropy can be tuned with the gate voltage, with the possibility to make the spin splitting negligible for electrons moving along a given direction, which in turn leads to drastic consequences for the spin relaxation and coherence times, as recently observed by Koralek et al. [1]. However, despite the increasing interest, there is so far poor agreement between theory and experiment regarding the SO anisotropy in semiconductor quantum wells. Here we theoretically investigate the SO splitting and its anisotropy in 2DEGs formed at inversion layers on p-type InGaAs.

As first discussed in Ref. [2], in the linear (in  $k_{\parallel}$ ) and infinite barrier approximation, such condition for zero-splitting and maximum anisotropy corresponds to Rashba and Dresselhaus interaction terms with the same strength. The anisotropy in this case is determined by a single parameter  $\alpha/\beta$ , given by the ratio between the two contributions;  $\alpha$  being the Rashba coupling parameter and  $\beta = \gamma \langle k_z^2 \rangle$ ,  $\gamma$  being the bulk Dresselhaus or  $k^3$  parameter and  $\langle k_z^2 \rangle$  the average momentum squared along the growth direction. Due to the interplay between the two terms, instead of the four-fold rotational symmetric splitting of symmetric quantum wells [3], the splitting in a heterojunction triangular well presents a reduced two-fold rotational symmetry with respect to the direction of the electron wave-vector in the plane  $\mathbf{k}_{\parallel}$ , as first observed by Jusserand et al. [4]. However, with barrier penetration, which in general can not be neglected, the situation



is somewhat different and the above parameter does not give anymore a good measure of the anisotropy. Here we discuss in particular the specific case of a InAlAs/InGaAs heterojunction, in which in general isotropy is assumed by neglecting the Dresselhaus contribution.

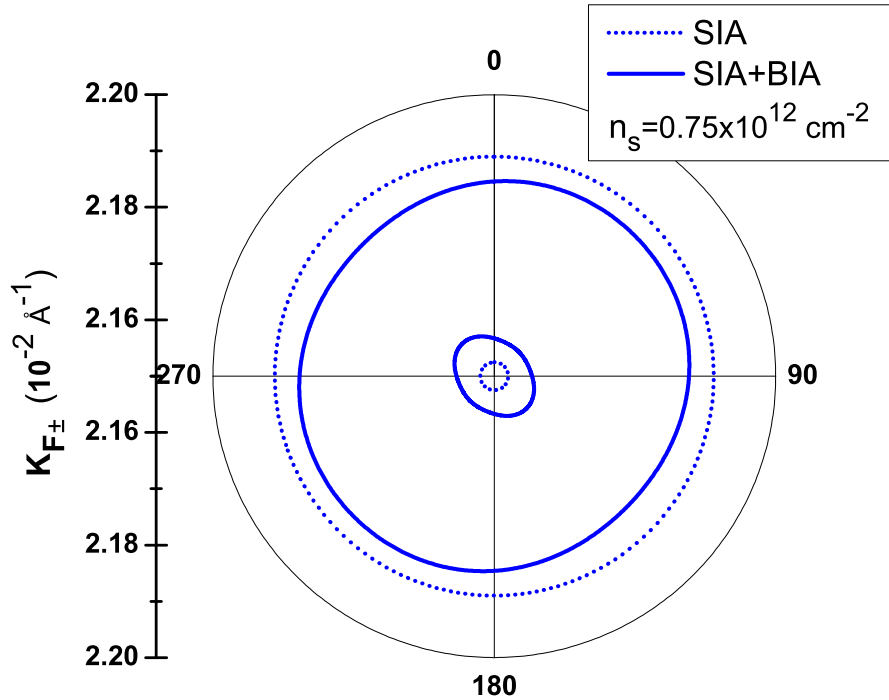
Experimentally, the spin-orbit splitting in these systems is often probed with the magneto oscillations; and its anisotropy by comparing spin-dependent results corresponding to the electron wave-vector along  $[11]$  and  $[1\bar{1}]$  in-plane directions. We therefore calculate the population difference between the split subbands (as determined from the magneto oscillations) and the splitting at the Fermi level, as a function of the 2DEG carrier concentration ( $n_s$ ) and Fermi wave-vector ( $k_F$ ) direction, with and without the Dresselhaus SO term, and compare with available experimental data within the limits of our model. The heterojunction electronic states are obtained starting with a recently proposed variational solution for the effective Hamiltonian within the envelope function approximation, [5, 6] based on Kane's  $k \cdot p$  model for the III-V bulk, and which gives only the Rashba splitting. The Dresselhaus spin-orbit term is then straightforwardly included via first-order quasi-degenerate perturbation theory, following Eppenga and Schuurmans [3]. Well known bulk parameters including  $\gamma$  were used in the calculation. They are listed in Ref. [7] and correspond to a recent 40-band semi-empirical tight-binding calculation in good agreement with the experiments.



**FIGURE 1.** Electron density difference between the spin-orbit split subbands as a function of the 2DEG total electron concentration  $n_s$ , calculated both with and without the Dresselhaus, or  $k^3$  contribution, for a  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As} / \text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  heterojunction.

Figure 1 shows the population difference ( $\delta n$ ) as a function  $n_s$ , obtained with (SIA+BIA) and without (SIA) the Dresselhaus term, for 2DEGs in a  $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$  heterojunction. The BIA contribution is clearly seen to be not negligible; it is seen to reduce considerably the population difference. As is commonly done, in reference [8], from the  $\delta n$  determined from the Shubnikov-de Haas (SdH) oscillations, an effective spin-orbit (or Rashba) parameter  $\alpha_{SdH} = 0.6 \times 10^{-11}$  eV m is estimated for the  $n_s = 1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  case. With the same transformation, the calculated  $\delta n$  in Figure 1 gives  $\alpha_{SdH} = 0.55 \times 10^{-11}$ , in very good agreement with the experiment.

Once the Dresselhaus term is not negligible, the resulting splitting is expected to be anisotropic. As shown in Figure 2, for a given Fermi energy, we then have Fermi wave vectors  $k_{F\pm}$  for the split subbands which vary with the in-plane direction. Note that indeed inclusion of the  $k_3$  term introduces anisotropy and reduces the difference in carrier concentration (given by the area inclosed) in the split subbands, as shown in Figure 1.



**FIGURE 2.** Fermi wave-vector for the split subbands in a  $n_s = 0.75 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  2DEG formed at an  $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As$  heterojunction.

Since barrier penetration is included in the calculation and has a significant effect in the resulting spin splitting, such anisotropy can not be discussed with the usual  $\alpha$  and  $\beta$  parameters. It must then be studied with the direct ratio between the total splitting along different directions. For instance, effective parameters, useful in the comparison with the

experimental data, can be defined from:

$$\Delta_s^{[11],[\bar{1}\bar{1}]} = (\alpha_{eff} \pm \beta_{eff})k_F^{[11],[\bar{1}\bar{1}]}, \quad (1)$$

with  $k_F = (k_{F+} + k_{F-})/2$ , i.e., from the calculated or measured total SO splitting for electrons traveling along the directions with expected maximum and minimum splittings.

Summarizing, we have investigated the SO interaction in InAlAs/InGaAs 2GEGs using a variational theory for the spin split subbands which is shown to be in good agreement with recent measurements. In particular, the Dresselhaus term has been shown to be non negligible and the spin-splitting to be anisotropic in InGaAs 2DEG systems. We have also commented on how to evaluate or access such SO anisotropy, which can not be done simply with the common  $\alpha$  and  $\beta$  parameters, due to the barrier penetration contribution. The present results indicate also that the Kane model plus inclusion of the BIA via perturbation theory forms a valid framework to study spin dependent properties in III-V semiconductor quantum wells.

We thank the Brazilian agencies CNPq, FAPESP and FAPESB for the financial support.

## REFERENCES

1. J. D. Koralek, C. P. Weber, J. Orenstein, B. A. Bernevig, S.-C. Zhang, S. Mack, and D. D. Awschalom, *Nature* **458**, 610–613 (2009).
2. E. A. de Andrada e Silva, *Phys. Rev. B* **46**, 1921(R)–1924 (1992).
3. R. Eppenga, and M. F. H. Schuurmans, *Phys. Rev. B* **37**, 10923(R)–10926 (1988).
4. B. Jusserand, D. Richards, G. Allan, C. Priester, and B. Etienne, *Phys. Rev. B* **51**, 4707(R)–4710 (1995).
5. M. A. Toloza Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **79**, 241305(R) (2009).
6. M. A. Toloza Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **83**, 235315 (2011).
7. J.-M. Jancu, R. Sholz, E. A. de Andrada e Silva, and G. La Rocca, *Phys. Rev. B* **72**, 193201–1–193201–4 (2005).
8. C. L. Yang, H. T. He, L. Ding, L. J. Cui, Y. P. Zeng, J. N. Wang, and W. K. Ge, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 186605 (2006).

## Rashba and Dresselhaus spin-orbit interaction strength in GaAs/GaAlAs heterojunctions

M. A. Toloza Sandoval<sup>1</sup>, A. Ferreira da Silva<sup>1</sup>, E. A. de Andrada e Silva<sup>2</sup> and G. C. La Rocca<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia 40210-340, Salvador, Bahia, Brazil

<sup>2</sup> Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, C.P. 515, 12201-970 São José dos Campos, São Paulo, Brazil

<sup>3</sup> Scuola Normale Superiore and CNISM, Piazza dei Cavalieri 7, I-56126 Pisa, Italy

### Abstract

Using a recently developed variational theory for the spin split subbands, we investigate the relative strength of the Rashba and Dresselhaus spin orbit terms in GaAs/GaAlAs heterojunctions. The envelope function formalism is employed using the 8-band  $k \cdot p$  Kane model for the bulk, and the Rashba split subbands are obtained with spin-dependent trial functions. The total spin splitting is then calculated analytically by including also the bulk Dresselhaus contribution via quasi-degenerate first order perturbation theory. The total spin-orbit splitting at the Fermi energy of the two dimensional electron gas (2DEG) is calculated as a function of the direction of the Fermi wave-vector. The obtained total spin-orbit splittings along  $[11]$  and  $[1\bar{1}]$  in-plane directions are shown to be in good agreement with recent experiments. The well known ratio  $\alpha/\beta$  between the Rashba and Dresselhaus contributions is a fundamental parameter in different proposals for new semiconductor spintronic devices. Due to barrier penetration and the corresponding spin dependent boundary conditions, the total spin-orbit anisotropy calculated here is shown to be in general determined by more than one parameter, and thus the above ratio should not be estimated using the common  $\alpha$  and  $\beta = \langle \gamma k_z^2 \rangle$  expressions.

© 2012 Published by Elsevier B.V. Selection and/or peer-review under responsibility of Universidade Federal de Juiz de Fora, Brazil.

**Keywords:** semiconductor spintronics, two-dimensional electron gas, spin-orbit interaction, III-V heterojunctions, experiment-theory comparison

### 1. Introduction

Different electronic devices have been developed thanks to the detailed knowledge of the electronic structure of semiconductor nanostructures. For new spintronic devices, in particular, the anisotropy of the spin-orbit interaction is attracting a lot of interest. As first discussed in ref. [1], there is a special anisotropy in the spin-orbit splitting of two-dimensional electron gases (2DEGs) formed at III-V semiconductor heterojunctions, which is due to the interplay between the two main contributions, namely Rashba and Dresselhaus. Instead of the four-fold rotational symmetry of the splitting in symmetric quantum wells (pure Dresselhaus) [2], the splitting in heterojunction triangular wells present a reduced two-fold rotational symmetry with respect to the direction of the electron wave-vector in the plane  $k_{\parallel}$ , as first observed by Jusserand et al. [3] with Raman spectroscopy.

It is a special anisotropy because it can be tuned with the gate voltage. In particular, there is the possibility to make the splitting very small or negligible for electrons moving along a given direction, with drastic consequences

for the spin relaxation and coherence times. In the linear (in  $k_{\parallel}$ ) and infinite barrier approximation, this corresponds to Rashba and Dresselhaus interaction terms with the same strength. The anisotropy in this case is determined by a single parameter  $\alpha/\beta$ , given by the ratio between the two contributions;  $\alpha$  being the Rashba coupling parameter and  $\beta = \gamma < k_z^2 >$ ,  $\gamma$  being the bulk Dresselhaus or  $k^3$  parameter and  $< k_z^2 >$  the average momentum squared along the growth direction. However, as we show here, it is in general not possible to separate the two contributions, and such ratio becomes ill defined. Indeed different and recent attempts to measure  $\alpha/\beta$  find very poor agreement with the theory [4]. Good agreement with recent experiments is obtained here using the total spin-orbit splittings along [11] and [1 $\bar{1}$ ] in-plane directions, from which effective  $\alpha^*$  and  $\beta^*$  can be deduced. For this purpose, a variational solution of the effective Hamiltonian for the envelope function is used and the Dresselhaus spin-orbit term included via first-order quasi-degenerate perturbation theory [2]. The total spin-orbit splitting at the Fermi level is calculated as a function of the 2DEG carrier concentration and Fermi wave-vector direction, and its anisotropy studied with different approximations. We compare our results with recent experimental data for the total splitting along different directions in GaAs/AlGaAs heterojunctions obtained with spin-dependent photo current (SPC) [4] and electron spin resonance (ESR) [5] techniques .

## 2. Model

Our calculation is based on a recently proposed spin resolved variational solution for the Rashba split electronic subbands in III-V heterojunctions [6, 7]. In the envelope function approximation, the Rashba split subbands correspond to the eigen-states of

$$H_R|\Psi_{\uparrow\downarrow}\rangle = \varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R(k_{\parallel})|\Psi_{\uparrow\downarrow}\rangle. \quad (1)$$

where  $H_R$  is the effective Hamiltonian (derived from the 8x8 Kane model) which includes barrier penetration effects, renormalized parameters and band nonparabolicity [6, 7]. We take these spin resolved envelope functions  $\Psi_{\uparrow\downarrow}$ , for polarized electrons in the first conduction subband, as our pair of quasi-degenerate unperturbed states. They are obtained variationally with the following trial functions:

$$\Psi_{\uparrow\downarrow}(z) = \begin{cases} A_{\uparrow\downarrow}e^{k_b z/2} & , z \leq 0 \\ B_{\uparrow\downarrow}(z + c_{\uparrow\downarrow})e^{-bz/2} & , z \geq 0 \end{cases} \quad (2)$$

where  $k_b = 2\sqrt{2\bar{m}v_0/\hbar^2}$  ( $\bar{m}$  being the renormalized effective mass in the barrier and  $v_0$  the conduction band-offset) and  $b$  is the variational parameter determined by minimizing the 2DEG total energy. The details of the calculations of  $A_{\uparrow\downarrow}$ ,  $B_{\uparrow\downarrow}$ ,  $c_{\uparrow\downarrow}$  and  $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}^R(k_{\parallel})$  are presented in Ref.[7]. With the resulting spin splitting  $\Delta_R$ , the Rashba parameter  $\alpha$  is then determined from:

$$\Delta_R(k_{\parallel}) = |\varepsilon_{\uparrow}^R(k_{\parallel}) - \varepsilon_{\downarrow}^R(k_{\parallel})| = 2\alpha k_{\parallel}. \quad (3)$$

The Dresselhaus spin-orbit term,

$$H_D = \gamma[\sigma_x k_x(k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y(k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z(k_x^2 - k_y^2)] \quad (4)$$

is then included via quasi-degenerate first order perturbation theory. The matrix elements  $\langle\Psi_{\uparrow\downarrow}|H_D|\Psi_{\uparrow\downarrow}\rangle$  can be easily calculated (recall though that  $\gamma$  is then allowed to vary along  $z$  and it is then necessary to symmetrize the corresponding integrals [2]). The obtained splitting, after diagonalization, is given by:

$$\Delta_s(k_{\parallel}, \theta) = \sqrt{[\Delta_R(k_{\parallel}) - (\langle\gamma(z)k_z^2\rangle_{\uparrow\uparrow} + \langle\gamma(z)k_z^2\rangle_{\downarrow\downarrow})k_{\parallel}\sin 2\theta + \frac{1}{2}(\langle\gamma(z)\rangle_{\uparrow\uparrow} + \langle\gamma(z)\rangle_{\downarrow\downarrow})k_{\parallel}^3\sin 2\theta]^2 + 4\langle\gamma(z)k_z^2\rangle_{\uparrow\downarrow}^2 k_{\parallel}^2 \cos^2 2\theta} \quad (5)$$

where  $\langle\gamma(z)\rangle_{\uparrow\uparrow} = \langle\Psi_{\uparrow}|\gamma(z)|\Psi_{\uparrow}\rangle$ ,  $\langle\gamma(z)k_z^2\rangle_{\uparrow\uparrow} = \langle\Psi_{\uparrow}|(-id/dz)\gamma(z)(-id/dz)|\Psi_{\uparrow}\rangle$  and so on. It is clear that the anisotropy in such splitting can not be determined with a single parameter. It is easy to show that in the limit of infinite barrier the above splitting reduces to  $\Delta_s = 2k_{\parallel}\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta\sin(2\theta)}$  (in the linear approximation), with the anisotropy determined by  $\alpha/\beta$ . Note that in this limit,  $\langle\gamma(z)k_z^2\rangle_{\uparrow\uparrow} = \langle\gamma(z)k_z^2\rangle_{\uparrow\downarrow} = \langle\gamma(z)k_z^2\rangle_{\downarrow\downarrow} = \beta$ . However, with barrier penetration these matrix elements present small differences and even with an averaged  $\beta$  it is clear that  $\alpha/\beta$  does not give in general a good measure of the anisotropy, which must then be studied with the direct ratio between the total splitting along different directions.

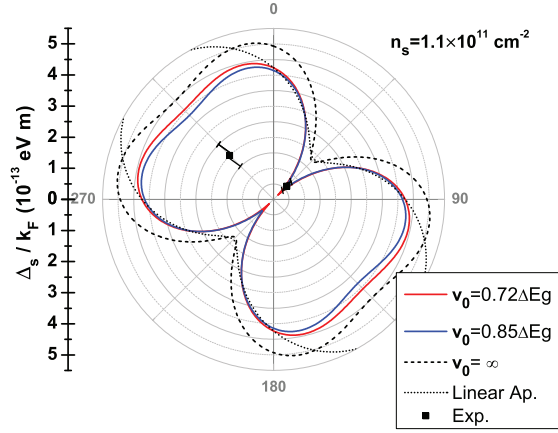


Figure 1: (color online). Total spin-splitting (divided by  $k_f$ ) calculated at the Fermi level of a  $n_s = 1.1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  GaAs/AlGaAs 2DEG. Angle zero corresponds to the  $[10]$  in plane direction. The cases  $v_0 = 269 \text{ meV}$  (red line) and  $v_0 = 318 \text{ meV}$  (blue line) show the dependence with the band-offset. The linear Dresselhaus approximation (dotted line), the perfect insulating barrier case (dash line) and the ESR data of ref. [5] are also shown. We used the value  $23.6 \text{ eV \AA}^3$  for the Dresselhaus spin-orbit coupling parameter in the GaAs [8], and the value  $19.7 \text{ eV \AA}^3$  obtained from a simple linear interpolation for such parameter in the AlGaAs.

Table 1: Comparison with experiment. Note that  $\alpha^*/\beta^*$  stands for the ratio between the effective coupling parameters, derived from the total splitting along  $[1\bar{1}]$  and  $[11]$  in-plane directions, as given by Eq.(6).

Heterostructure	Ref.	Techn.	Experiment		Theory	
			$n_s$ ( $10^{11} \text{ cm}^{-2}$ )	$\alpha^*/\beta^*$	$\alpha^*/\beta^*$	$\alpha/\beta$
$Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$	[5]	ESR	1.1	$\sim 1$	1.3	0.49
	[4]	SPC	1.1	7.6	1.3	0.49
	[4]	SPC	1.3	2.8	1.2	0.52
	[4]	SPC	1.8	1.5	1.1	0.59

### 3. Results

The system here considered is a GaAs/AlGaAs heterojunction with varying  $n_s$ . In Figure 1, we plot the total spin splitting calculated at the Fermi level as a function of wave-vector direction for  $n_s = 1.1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Results obtained within different approximations are compared together with the ESR experimental data of Frolov et al. [5], for the splitting along  $[11]$  and  $[1\bar{1}]$  directions. The best agreement is obtained with the complete model, i.e. including the finite band offset and the Dresselhaus cubic terms; indicating the importance of both barrier penetration and higher order terms in these structures. In particular, the cubic Dresselhaus terms are seen to be responsible for a strong reduction in the splitting along the  $[1\bar{1}]$  direction (45 degrees in the figure). A small sensitivity of the splitting with respect to the most used values for the band-offset is also observed.

In order to best test the present results with the available data, it is convenient to define  $\alpha^*/\beta^*$ , determined from the calculated (and/or measured) total splitting  $\Delta_s$  along the perpendicular  $[11]$  and  $[1\bar{1}]$  in-plane directions. In the linear approximation, they correspond to the directions with minimum and maximum splitting respectively, and one has:

$$\frac{\alpha^* - \beta^*}{\alpha^* + \beta^*} = \frac{\Delta_s^{[11]}}{\Delta_s^{[1\bar{1}]}}. \quad (6)$$

In Table I, we compare both  $\alpha^*/\beta^*$  and  $\alpha/\beta$  with different experimental data. As indicated, the experimental data correspond to  $\alpha^*/\beta^*$  and indeed are seen to agree well with the calculated values including the  $n_s$  dependence. Instead, the usual  $\alpha/\beta$  parameter presents the opposite behavior and is numerically much less close to the data. We note large

uncertainties in the experimental data, as in the  $n_s = 1.1$  case where the different data differ by a large amount. In particular the large 7.6 result for  $\alpha^*/\beta^*$  corresponds to a sample with larger potential fluctuations, and in view of the deviations with respect to samples with larger densities might be affected by other effects. We can then conclude that in GaAs/GaAlAs 2DEG systems the anisotropy of the spin-orbit interaction should be studied by looking at the total splitting, rather than at the standard  $\alpha/\beta$  parameter.

#### 4. Conclusions

In summary, we have seen that the present variational theory for the Rashba effect, with the Dresselhaus corrections included perturbatively, is able to give a fair description of the spin-orbit anisotropy in GaAs 2DEGs. The correct way to interpret the corresponding measurements has also been discussed, and the use of the standard  $\alpha/\beta$  parameter criticized. Good agreement with the experiment indicate that the model may be useful for spintronic applications. Further tests with other III-V semiconductor structures are however needed to fully assess the limits of the present model calculation.

#### 5. Acknowledgments

The authors thank the Brazilian agencies CNPq, CAPES and FAPESB for financial support.

#### 6. References

- [1] E. A. de Andrada e Silva, Phys. Rev. B **46**, 1921(R) (1992).
- [2] R. Eppenga and M.F.H. Schuurmans, Phys. Rev. B **37**, 10923(R) (1988).
- [3] B. Jusserand, D. Richards, G. Allan, C. Priester and B. Etienne, Phys. Rev. B **51**, 4707(R) (1995).
- [4] S. Giglberger et al., Phys. Rev. B **75**, 035327 (2007).
- [5] S.M. Frolov, S. Lüscher, W. Yu, Y. Ren, J.A. Folk, and W. Wegscheider, Nature **458**, 868 (2009).
- [6] M.A.T. Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrada e Silva and G. C. La Rocca, Phys. Rev. B **79**, 241305(R) (2009).
- [7] M.A.T. Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrada e Silva and G. C. La Rocca, Phys. Rev. B **83**, 235315 (2011).
- [8] J.-M. Jancu, R. Scholz, E. A. de Andrada e Silva and G. C. La Rocca, Phys. Rev. B **72**, 193201 (2005).

16th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics, BWSP16, 10 May 2013, Itirapina,  
São Paulo, Brazil

## Effective electron g-factor in asymmetric quantum wells

M. A. Toloza Sandoval<sup>a</sup>, A. Ferreira da Silva<sup>a</sup>, G. C. La Rocca<sup>b</sup>, E. A. de Andrada e  
Silva<sup>c,\*</sup>

<sup>a</sup>*Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia 40210-340, Salvador, Bahia, Brazil*

<sup>b</sup>*Scuola Normale Superiore and CNISM, Piazza dei Cavalieri 7, I-56126 Pisa, Italy*

<sup>c</sup>*Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, C.P. 515, 12201-970 São José dos Campos, São Paulo, Brazil*

---

### Abstract

A theory for the renormalization of the electron g-factor due to the mesoscopic confining potential in a semiconductor quantum well (QW) was recently presented by Toloza Sandoval et al. (2012), using standard envelope-function approximation and Kane's model for the bulk. It provides a simple physical picture for the QW g-factor anisotropy and is in good agreement with the experiment; however, it considers only the case of symmetric QWs. Here we discuss the extension of such theory to general flat band asymmetric QWs. A simple analytic expression is found for the electron effective g-factor in these wells, which further shows that in these nanostructures, the spin-orbit origin of both Rashba and effective Zeeman effects is indeed the same.

© 2014 The Authors. Published by Elsevier B.V.

Selection and peer-review under responsibility of Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo.

*Keywords:* electron g-factor; semiconductor nanostructures, spintronics

---

### 1. Introduction

The Zeeman effect, i.e. the spin splitting of the electronic states in response to an external magnetic field, has played a fundamental role in the development of atomic physics. More recently, there has been much interest in the Zeeman effect for electrons in semiconductor nanostructures, in particular for spin manipulation and semiconductor spintronics development. Analogous to the effective mass ( $m^*$ ), the Landé g-factor in nanostructures, which determines such splitting, is renormalized from the bare value 2, by both band structure and confinement effects, and is referred to as the effective electron g-factor ( $g^*$ ). A simple theory for  $g^*$  in III-V semiconductor quantum wells (QWs) was recently presented by Toloza Sandoval et al. (2012), with results in good agreement with the experiment. The confinement effects in the effective g-factor (i.e. from the interfaces) were shown to be similar and derived from the same spin-orbit (SO) term as the Rashba effect. However, only the simpler case of symmetric square QWs was discussed by Toloza Sandoval et al. (2012). Here we extend such theory and consider the general case of asymmetric QWs. A simple

---

\* Corresponding author. Tel.: +55-12-30826407.

E-mail address: [edeandrada@gmail.com](mailto:edeandrada@gmail.com)



solution is obtained that helps further clarify such close connection between the effective g-factor and the SO Rashba effect in semiconductor QWs.

## 2. Bulk and symmetric QW g-factors

The electron  $g^*$  in bulk III-V semiconductor compounds is well described by the Roth  $k \cdot p$  formula

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

plus corrections from remote bands, i.e. those beyond Kane's model ( $m^*/m_e$  being the electron effective mass in units of the free-electron mass,  $\Delta$  the valence-band SO splitting and  $E_g$  the fundamental energy gap). This formula was derived by Roth et al. (1959) with second-order perturbation theory and by Kim et al. (1989) with the exact solution of the Kane model at the conduction band edge. In QWs, Toloza Sandoval et al. (2012) have shown that in good approximation, for magnetic field  $\vec{B}$  along the growth direction,  $g_{QW}^* = \bar{g}_{bulk}^*$ , i.e. the QW effective g-factor is given by the averaged bulk g-factor, as observed experimentally by Smith and Fang (1987); Zhao et al. (1996), Sirenko et al. (1997), and with spin quantum beats by Hannak et al. (1995); Jeune et al. (1997); Malinowski and Harley (2000).

However, in the same order of approximation, for  $\vec{B}$  in-plane, an additional mesoscopic or confinement contribution is obtained, which therefore gives the effective g-factor anisotropy  $\Delta g_{QW}^*$ , predicted by Ivchenko and Kiselev (1992), in the following simple form:

$$\Delta g_{QW}^* = g_{\perp}^* - g_{\parallel}^* = \frac{4m_e}{\hbar^2} \delta\beta L |f^{(0)}(L/2)|^2, \quad (2)$$

where  $\delta\beta = \beta_{well} - \beta_{barrier}$ , with

$$\beta_i = \frac{P^2}{2} \left[ \frac{1}{\varepsilon - E_v^{(i)}} - \frac{1}{\varepsilon - E_v^{(i)} + \Delta_i} \right]; \quad (3)$$

( $\varepsilon$  being the electron energy and  $E_v^{(i)}$  that of the valence band edge in the material  $i$ , well or barrier);  $L$  is the well width and  $f^{(0)}(L/2)$  is the unperturbed envelope function for electrons in the ground state of the QW, calculated at the interface. The QW is assumed to be symmetric, with equivalent interfaces at  $z = \pm L/2$ . Such expression gives a good description of the detailed spin quantum beat measurements of  $\Delta g_{QW}^*$  as a function of  $L$  by Jeune et al. (1997) and by Malinowski and Harley (2000), and is here generalized for asymmetric QWs.

## 3. Asymmetric quantum wells

Consider now an asymmetric QW as illustrate in Figure 1 with different right and left barriers, as in GaAs/GaAlAs QWs with different Al concentrations in each side of the well (i.e.  $GaAl_xAs_{1-x}/GaAs/GaAl_yAs_{1-y}$  QWs with  $x \neq y$ ). Following Toloza Sandoval et al. (2012), with the same coordinate system and gauge, it is straight forward to obtain from  $\langle H_Z \rangle$  a contribution similar to that in the symmetric QW case, given by:

$$\Delta g_{QW}^* = \frac{4m_e}{\hbar^2} \frac{L}{2} \left( \delta\beta_1 |f^{(0)}(-L/2)|^2 + \delta\beta_2 |f^{(0)}(L/2)|^2 \right) \quad (4)$$

where  $\delta\beta_i = \beta_w - \beta_i$ , with  $i = 1, 2$  indicating the two non-equivalent interfaces (and barriers) at  $z = -L/2$  and  $L/2$ , respectively. However, we must consider that now (in an asymmetric QW) the state with lowest energy does not correspond anymore to that with the center of the cyclotron orbit at  $z = 0$ , i.e. at the center of the well, but at a different position, that we call  $\bar{z}$ . Since the center of the orbit is given by  $\bar{z} = -l^2 k_x$  (where  $l = \sqrt{\hbar/eB}$ ), we get that the wave-vector  $k_x$  of such state is non-zero and has an absolute value that increases linearly with the magnetic field strength  $B$ . It then means that in this asymmetric case, the Rashba coupling  $H_R$  acts as a Zeeman term and must also be considered in the calculation of the Zeeman splitting (and corresponding effective g-factor). Substituting such  $k_x$

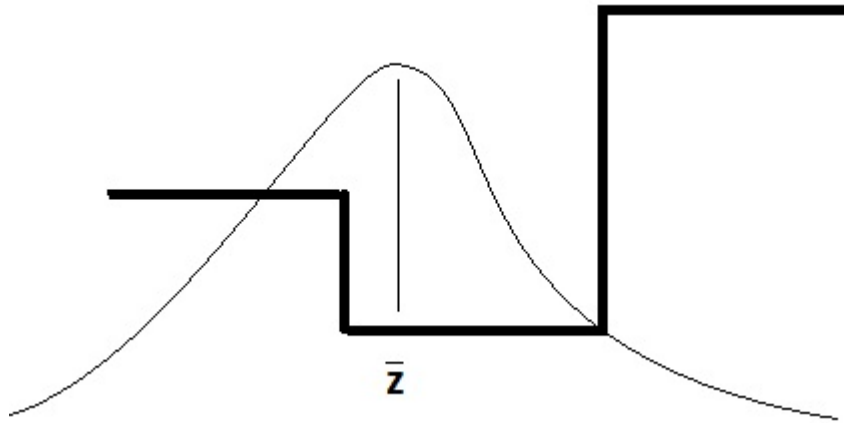


Fig. 1. Illustration of an asymmetric quantum well, with different left and right barriers, of the ground state envelope function and of the center-of-the-orbit position  $\bar{z}$ , corresponding to the bottom of the conduction band. The two interfaces (1 and 2 in the text) are non-equivalent, and  $\bar{z} \neq 0$  (i.e. not at the center of the well, but pushed towards the lower barrier side).

in  $H_R$ , taking the usual expectation value and adding its contribution to that above from  $H_Z$ , we obtain the following total anisotropy for the effective electron g-factor in asymmetric (flat band) QWs:

$$\Delta g_{QW}^* = \frac{4m_e}{\hbar^2} \left( \delta\beta_1 |f_1^{(0)}|^2 \left( \frac{L}{2} + \bar{z} \right) + \delta\beta_2 |f_2^{(0)}|^2 \left( \frac{L}{2} - \bar{z} \right) \right) \quad (5)$$

where we now use  $f_i^{(0)}$  for the unperturbed envelope function at the interface  $i$ . In the symmetric limit, when the barriers are equal,  $f_1^{(0)} = f_2^{(0)}$ ,  $\delta\beta_1 = \delta\beta_2$ ,  $\bar{z} = 0$  and the result in Eq. (2) is recovered. One then sees that in order to determine the effective g-factor in asymmetric QWs, all one has to do is to solve  $H_0$ , calculate  $\varepsilon$ ,  $\bar{z}$  and  $f_i^{(0)}$ , and plug them into the above Eq. (5). Finally one can check that this result is gauge invariant; for instance, our result (Eq.(5)) can be easily obtained also with the gauge corresponding to  $\vec{A} = ((z - \bar{z})B, 0, 0)$ .

#### 4. Conclusions

To conclude, we have considered the theory of the effective electron g-factor in III-V semiconductor quantum wells,  $g_{QW}^*$ , and in particular, the main anisotropy between the cases with magnetic field parallel and perpendicular to the growth direction ( $\Delta g_{QW}^*$ ) in asymmetric QWs. The theory by Toloza Sandoval et al. (2012), based on Kane's model for the bulk and standard envelope-function approximation for the mesoscopic effects, has been extended and an expression for  $\Delta g_{QW}^*$  is obtained that applies to generic flat-band asymmetric QWs. The formula can be readily used in the study of the g-factor in different QW structures, and  $\bar{z}$  as another tuning parameter to be used in the nanostructure design for g-factor engineering. The present solution for asymmetric QWs forms also another example of the common SO basis for both Rashba and effective Zeeman effects in QWs.

#### Acknowledgements

The authors thank the Brazilian agencies CNPq, FAPESP, CAPES and FAPESB for financial support. EAAS is also thankful to the Scuola Normale Superiore di Pisa, for the kind hospitality during part of this work.

#### References

M. A. Toloza Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, Physical Review B **86**, 195302 (2012).

- L. M. Roth, B. Lax, and S. Zwerdling, *Phys. Rev.* **114**, 90 (1959).
- N. Kim, G. C. La Rocca, and S. Rodriguez, *Phys. Rev. B* **40**, 3001 (1989).
- T. P. Smith III and F. F. Fang, *Phys. Rev. B* **35**, 7729 (1987).
- R. M. Hannak, M. Oestreich, A. P. Heberle, W. W. Rühle, and K. Köhler, *Solid State Commun.* **93**, 313 (1995).
- Q. X. Zhao, M. Oestreich, and N. Magnea, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 3704 (1996).
- A. A. Sirenko, T. Ruf, M. Cardona, D. R. Yakovlev, W. Ossau, A. Waag, and G. Landwehr, *Phys. Rev. B* **56**, 2114 (1997).
- P. Le Jeune, D. Robart, X. Marie, T. Amand, M. Brosseau, J. Barrau, and V. Kalevcih, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 380 (1997).
- A. Malinowski and R. T. Harley, *Phys. Rev. B* **62**, 2051 (2000).
- E. L. Ivchenko and A. A. Kiselev, *Fiz. Tekh. Poluprovodn. (S.- Peterburg)* **26**, 1471 (1992) [*Sov. Phys. Semicond.* **26**, 827 (1992)].