



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

INSTITUTO DE FÍSICA

**TENSOR GIROMAGNÉTICO EFETIVO PARA ELÉTRONS EM  
MULTICAMADAS SEMICONDUTORAS**

Jhon Elber Leon Padilla

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 Dr. Marcelo Alejandro Toloza Sandoval, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Salvador  
2021





UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

INSTITUTO DE FÍSICA

**TENSOR GIROMAGNÉTICO EFETIVO PARA ELÉTRONS EM  
MULTICAMADAS SEMICONDUTORAS**

Jhon Elber Leon Padilla

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 Dr. Marcelo Alejandro Toloza Sandoval, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Salvador  
2021

Padilla, Jhon Elber Leon

Tensor giromagnético efetivo para elétrons em multicamadas semicondutoras. Salvador, 2021.

Orientador: Antonio Ferreira da Silva

Coorientador: Marcelo Alejandro Toloza Sandoval

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

1. Nanociênciа. 2. Spintrônica. 3. Materiais Semicondutores. 4. Fator g de Spin. 5. Interação Spin-Órbita.

Doutorado em Física.



## **AGRADECIMENTOS**

Imprescindíveis para conclusão deste trabalho, agradeço ao Prof. Dr. Antonio Ferreira da Silva, que com sua oportuna e paciente orientação, sua honestidade e compromisso com a ciência no Brasil, deixa-me um grande exemplo e legado; agradeço ao Dr. Marcelo Alejandro Toloza Sandoval, mais que um coorientador, o considero um grande amigo que me levou ao campo da spintrônica, delineando em grande parte os problemas e a pesquisa aqui abordados. Agradeço ao Prof. Dr. Erasmo de Andrade e Silva, pelas discussões de grande valor científico que ocorreram durante minha visita ao Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (em São José dos Campos, São Paulo). Agradeço aos servidores do setor administrativo da IF-UFBA: Marli, que nos deu suporte inicial, quando mais precisávamos, e também Marco e Mary. Meus sinceros agradecimentos aos meus amigos da Colômbia: Mozo, Laura Lara, Leonardo Fabio, Jairo, Daniel, Oscar, Alfredo e Franklin, ao amigo peruano, Adin, aos meus amigos do curso (e de prédio!), Tércio e Elenilson, e também aos amigos e colegas do curso de Pós-Graduação em Física. Em especial, ao meus pais, minha irmã e sobrinha, agradeço pelo apoio, motivação e incentivo. Agradeço aos professores do Laboratório de Propriedades Ópticas, em especial, ao professor Jailton Almeida, que sempre se mostrou muito receptivo, tanto do ponto de vista pessoal quanto profissional, e que infelizmente nos deixou muito cedo, mas que permanecerá em nossos pensamentos. Serei sempre muito grato aos professores do Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia, pela formação e pelos demais ensinamentos que carregarei para meu futuro e para a vida, de maneira geral. Meus mais sinceros agradecimentos ao povo baiano, povo de muitas lutas, mas que jamais perde a alegria que lhes é característica. Por fim, pelo suporte financeiro que me foi concedido em função da realização deste trabalho, agradeço à coordenação de aperfeiçoamento de pessoal de nível superior CAPES.



## RESUMO

Um pilar para o desenvolvimento de dispositivos spintrônicos e materiais topológicos, a engenharia do fator  $g$  eletrônico ainda se baseia extensivamente na manipulação do fator  $g$  efetivo no cristal volumétrico (ou *bulk*), cujo valor é fortemente dependente do *gap* fundamental do material. Por exemplo, ligas semicondutoras III-V de *gap* estreito com grande fator  $g$  efetivo são peças fundamentais de nanoestruturas promissoras na busca por férmiões de Marajóra. No entanto, outro mecanismo de renormalização torna-se relevante em nanoestruturas semicondutoras, devido ao confinamento quântico mesoscópico. Quando comparado com os efeitos de *bulk*, esse confinamento introduz anisotropias extras que transformam fatores escalares  $g$  em tensores. Os detalhes deste dito processo de renormalização mesoscópica não são totalmente compreendidos e constituem um tópico atual de pesquisa fundamental e aplicada em física da matéria condensada. Aqui nós investigamos e analisamos teoricamente os diferentes mecanismos de renormalização, de *bulk*, de interface, de assimetria de inversão de estrutura e de tunelamento quântico, do fator  $g$  eletrônico em multicamadas semicondutoras III-V. Considerando campos magnéticos aplicados longitudinal e transversalmente, obtemos os fatores  $g$  correspondentes usando a teoria de perturbação de primeira ordem dentro de um formulação analítica precisa, com base na aproximação da função de envelope e no modelo de Kane  $8 \times 8 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  para o *bulk*. O tensor- $g$  (ou seja, componentes longitudinais e transversais) e a anisotropia correspondente são analisados ao longo do espaço inteiramente abrangido pelos dois parâmetros estruturais, ou seja, a espessura das camadas ativas e a espessura da barreira de tunelamento (entre as camadas ativas). Seguindo tal prescrição, considerando as multicamadas baseadas em InGaAs, InAs e InSb, investigamos a dependência dos resultados obtidos com a estrutura de bandas do *bulk* e estudamos a sintonia fina das componentes do tensor  $g$  efetivo com os parâmetros estruturais. Analisamos o regime de camadas ativas ultrafinas fortemente interagentes e, em particular, o papel desempenhado pela assimetria de inversão de estrutura, que leva à inversão do sinal de anisotropia do fator  $g$  em um regime próximo ao confinamento crítico (limite permitido para estados ligados), e sua dependência com a posição do centro da órbita ciclotrônica. Consistente em todo o espaço de parâmetros, o formalismo apresentado abre um caminho para a nanoengenharia de spin, permitindo um cálculo simples e uma interpretação física transparente do fator  $g$  de nanoestruturas.



## ABSTRACT

A cornerstone for the development of spintronic devices and topological materials, the electron g-factor engineering is yet extensively based on manipulating the g-factor of the bulk material, which is strongly dependent on the band-gap energy. For example, narrow-gap III-V semiconductor alloys with large effective g-factor are fundamental pieces of nanostructures promising in the search for Majorana fermions. However, another renormalization mechanism becomes relevant in semiconductor nanostructures due to the mesoscopic quantum confinement. When compared with bulk effects, this confinement introduces extra anisotropies transforming scalar g factors into tensors. Details of this so-called mesoscopic renormalization process are not fully understood and form a current topic of fundamental and applied research in condensed matter physics. Here, we theoretically investigate and analyze the different renormalization mechanisms, from bulk, interface, structure inversion asymmetry, and quantum tunneling, on the electronic g-factor in III-V semiconductor multilayer structures. Considering both longitudinal and transverse applied magnetic fields, we obtain the corresponding g-factors using first-order perturbation theory within an accurate analytical framework based on the envelope function approximation and  $8 \times 8 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Kane model for the bulk. The g-tensor (i.e., longitudinal and transverse components) and the corresponding anisotropy are analyzed over the entire space spanned by the two structural parameters, i.e., the thickness of the active layers and the thickness of the tunneling barrier (between the active layers). Following such prescription, considering InGaAs, InAs, and InSb based multilayers, we investigate the dependency of the obtained results on the bulk bandstructure and study the fine-tuning of the effective g-tensor components with the structural parameters. We analyze the regime of the strongly interacting ultra-thin active layers and, in particular, the role played by the structure inversion asymmetry that leads to the g-factor anisotropy signal inversion at a regime near the critical confinement (the limit for bound-states allowed), depending on the position of the center of the cyclotron motion. Consistent over the whole space of parameters, the presented framework opens a road to spin-nanoengineering, allowing for a simple calculation and transparent physical interpretation of the nanostructure's g-factor.



## SUMÁRIO

	<u>Pág.</u>
<b>LISTA DE FIGURAS</b>	
<b>1 INTRODUÇÃO</b>	<b>17</b>
1.1 Interação spin-órbita	19
1.2 Remoção da degenerescência de spin em cristais e heteroestruturas	21
<b>2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b>	<b>31</b>
2.1 Método k.p	31
2.1.1 Modelo de Kane	34
2.1.2 Fator $g$ efetivo em semicondutores volumétricos	40
2.1.3 Hamiltoniano de massa efetiva e função envelope	44
2.2 Tensor $g$ efetivo em heteroestruturas bidimensionais	49
<b>3 RESULTADOS</b>	<b>53</b>
3.1 Semicondutores de <i>gap</i> estreito	61
<b>4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS</b>	<b>71</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>73</b>
<b>A - ANEXO: PUBLICAÇÕES E MANUSCRITOS</b>	<b>81</b>



## LISTA DE FIGURAS

	<u>Pág.</u>
1.1 Representação esquemática do <i>gap</i> de Dirac (para o elétron livre) e do <i>gap</i> de energia de um semicondutor. Fonte: elaboração própria do autor. . . . .	21
1.2 Relações de dispersão degeneradas por spin, para estruturas cristalinas que apresentam um centro de inversão no espaço. Fonte: elaboração própria do autor. . . . .	22
1.3 Quebra da degenerescência das relações de dispersão para estados com spins opostos em cristais que não apresentam um centro de inversão no espaço. Fonte: elaboração própria do autor. . . . .	22
1.4 Eixos das coordenadas espaciais $x$ , $y$ e $z$ , com a representação de um sistema quase-bidimensional ao lado, tomando $z$ como direção de crescimento/confinamento. Mostra a situação de um elétron que se move com momento $p$ , e que percebe o campo elétrico com origem no gradiente do potencial mesoscópico ( $\nabla u$ ), como um campo magnético efetivo, denotado por $\mathbf{B}_{eff}$ . . . . .	23
1.5 À esquerda, mostra a diagramação da banda de condução e a função de onda eletrônica, no painel superior. No painel inferior, mostra apenas a descontinuidade do potencial da banda de condução, conforme a interface entre os materiais que compõem a heteroestrutura. À direita, mostra, de forma genérica, a estrutura de bandas de energia em uma liga semicondutora III-V, nas vizinhanças do ponto $\Gamma$ , restrita à primeira banda de condução (CB), e as bandas de valência: buraco pesado (HH), buraco leve (LH) e <i>split-off</i> (SO). $E_g$ e $\Delta$ são energias de separação das bandas no ponto $\Gamma$ . Fonte: elaboração própria do autor. . . . .	25
1.6 À esquerda, mostra da relação de dispersão de um elétron livre, ou seja, uma parábola (em $k_{\parallel}$ ) e, acima, temos a projeção do nível de Fermi no plano $k_x - k_y$ . Na figura à direita, apenas consideramos, adicionalmente, o acoplamento Rashba. . . . .	26
1.7 Campo magnético efetivo dependente do vetor de onda, oriundo da assimetria de inversão estrutural ou efeito Rashba. . . . .	26
1.8 Mostra a quebra degenerescência de spin de um nível de Landau, em decorrência da interação Zeeman, resultando em duas paráolas idênticas separadas verticalmente. (b) Para efeito de comparação, mostra-se a quebra da degenerescência promovida pelo efeito Rashba. . . . .	27
2.1 Ilustração de um rede cristalina genérica obtida a partir dos vetores primitivos $\mathbf{a}_1$ , $\mathbf{a}_2$ e $\mathbf{a}_3$ . . . . .	32

2.2	Diferentes materiais semicondutores com seus correspondentes pontos de alta simetria. Adaptado de (CHELIKOWSKY; COHEN, 1974) . . . . .	32
2.3	Massas efetivas e <i>gaps</i> para diferentes materiais semicondutores. . . . .	34
2.4	Principais bandas de energia consideradas no método perturbativo <b>k.p.</b> . . . . .	39
2.5	Bandas de energia consideradas no modelo de Kane 8x8. . . . .	43
2.6	Valores experimentais do fator $g$ para semicondutores III-V, e seus respectivos parâmetros. . . . .	48
2.7	À direita temos a representação gráfica de uma superfície de energia constante, com fatores giromagnéticos isotrópicos, ou seja, $g_{xx} = g_{yy} = g_{zz}$ . À esquerda temos uma representação gráfica potencial mesoscópico de confinamento como um indicativo da quebra a isotropia espacial dos fatores giromagnéticos, isto é, $g_{xx} = g_{yy} \neq g_{zz}$ . . . . .	49
3.1	Ilustração do perfil de potencial das bandas de valência e condução para um poço quântico duplo simétrico, com poços de largura $L_w$ e barreira central de largura $L_b$ . Fonte: elaboração própria. . . . .	53
3.2	Ilustração do perfil de potencial da banda de condução para um poço quântico duplo assimétrico (ADQW), com poços de largura $L_w$ separados por barreira de largura $L_b$ e altura $V_0$ . . . . .	54
3.3	Resultados obtidos para SDQWs. Em (a), na parte superior temos a representação esquemática do potencial da banda de condução e da função de onda, iniciando pelo caso limite de poço simples ( $L_b = 0$ ), passando pelo caso de poço interagentes e, por fim, não-interagentes ( $L_b$ largo); mostra-se, logo abaixo, a função de onda variando gradativamente com a largura da barreira (que varia em unidades de $0.2\text{ nm}$ ), considerando camadas ativas (ou poços) de largura de $2\text{ nm}$ . Em (b) e (c) temos os fatores $g$ para campos magnéticos nas configurações perpendicular e paralela, onde utilizamos a mesma malha utilizada em (a). Em (d), temos a anisotropia correspondente, ou seja, $\Delta g^{DQW}$ . Os seguintes parâmetros foram utilizados: $g_{InP}^* = 1.2$ , $g_{InGaAs}^* = -4.5$ , $E_g^{InP} = 1.424\text{ eV}$ , $E_g^{InGaAs} = 0.813\text{ eV}$ , $\Delta_{so}^{InP} = 0.108\text{ eV}$ , $\Delta_{so}^{InGaAs} = 0.326\text{ eV}$ , $m_{InGaAs}^* = 0.041$ , sendo a altura da barreira de $0.244\text{ eV}$ . . . . .	55

3.4	(a) Na parte superior, mostra-se uma ilustração do potencial da banda de condução e da função de onda, iniciando pelo caso de poço simples assimétrico para $L_b = 0$ , passando pelo caso de poços interagentes e, por fim, o caso de $L_b$ largo, para o qual a função de onda se concentra completamente no poço simétrico; mostra-se, logo abaixo, a função de onda quando variamos gradativamente (em unidades de $0.2 \text{ nm}$ ) a largura da barreira, considerando camadas ativas fixas com largura de $2 \text{ nm}$ . Em (b) e (c) temos os fatores $g$ para campos magnéticos nas configurações perpendicular e paralela, e em (d) a anisotropia correspondente. Os parâmetros utilizados foram os mesmos da Fig. 3.3. . . . .	57
3.5	Energia do estado eletrônico fundamental, quando confinado em uma estrutura multicamadas assimétrica do tipo <i>isolante/InGaAs/InP/InGaAs/InP</i> , descrita como um poço assimétrico ( <i>isolante/InGaAs/InP</i> ) acoplado com um poço simétrico ( <i>InP/InGaAs/InP</i> ). . . . .	58
3.6	Posição do centro da órbita do ciclotrônica, dado pelo valor esperado da posição, em função da largura da barreira de tunelamento $L_b$ , onde variamos $L_w$ em unidades de $0,05 \text{ nm}$ , partindo do confinamento crítico ( $L_w = 1.35 \text{ nm}$ ) até o valor de estabilização ( $L_w = 1.35 \text{ nm}$ ). No painel interno, considerando esses mesmos valores de $L_w$ , mostramos a funções de onda para $L_b = 1.0 \text{ nm}$ . No painel inferior, mostramos a anisotropia giromagnética em direta e completa correspondência às curvas de $z_0$ mostradas no painel superior. . . . .	59
3.7	Anisotropia giromagnética ( $\Delta g = g_{\perp} - g_{\parallel}$ ) como função contínua das larguras dos poços $L_w$ e da barreira que os separa $L_b$ . Note o pequeno domínio de valores negativos em (b), com um valor extremo global de $\Delta g = -2.4$ no limite de camadas ativas finas fortemente interagentes. . . . .	60
3.8	Representação gráfica do diagrama de bandas das heteroestruturas, com particular ênfase no gap dos materiais semicondutores considerados neste trabalho. . . . .	62
3.9	Para estruturas de poço simples do tipo <i>AlSb/InAs/AlSb</i> e <i>CdTe/InSb/CdTe</i> , considerando campos magnéticos nas configurações paralela $\parallel$ e perpendicular $\perp$ , temos os correspondentes fatores $g$ efetivos dados como funções das larguras dos poços (ou seja, das camadas ativas desses sistemas). . . . .	63
3.10	À esquerda temos uma representação esquemática de uma estrutura multicamadas, onde consideramos possíveis camadas ativas compostas por semicondutores de <i>gap</i> estreito ( <i>InSb</i> e <i>InAs</i> ), e à direita temos o perfil do potencial da banda de condução, com um centro de inversão espacial sobre a barreira posicionada entre os poços. . . . .	64

- 3.11 Conforme a representação esquemática da Fig. 3.10, considerando as estruturas multicamadas  $AlSb/InAs/AlSb/InAs/AlSb$  e  $CdTe/InSb/CdTe/InSb/CdTe$ , mostramos aqui os fatores g para campos magnéticos nas configurações perpendicular e paralela, e a anisotropia correspondente, como funções contínuas das larguras das camadas ativas. A análise se inicia pelo caso de poço simples simétrico para  $L_b = 0$ , e variando gradativamente, em unidades de  $0.2\text{ nm}$ , a largura da barreira central, passamos pelo caso de poços interagentes, até alcançarmos o limite de  $L_b$  largo, em que as camadas ativas estão desacopladas. Os parâmetros utilizados são aqueles presentes na Tab. 3.1. . . . . 65
- 3.12 Conforme a representação esquemática da Fig. 3.10, considerando as estruturas multicamadas  $AlSb/InAs/AlSb/InAs/AlSb$  e  $CdTe/InSb/CdTe/InSb/CdTe$ , mostramos aqui os fatores g para campos magnéticos nas configurações perpendicular e paralela, e a anisotropia correspondente, como funções contínuas da largura da barreira central ( $L_b$ ), onde variamos gradativamente a largura das camadas ativas ( $L_w$ ) em unidades de  $1\text{ nm}$ . A análise se inicia por um *bulk* formado pelo material da barreira, quando  $L_w = 0$ , e alcança o caso de um *bulk* formado pelo material do poço para  $L_w$  largo. Utilizamos os parâmetros de acordo com a Tab. 3.1. . . . . 66
- 3.13 Considerando os sistemas  $AlSb/InAs/AlSb/InAs/AlSb$  e  $CdTe/InSb/CdTe/InSb/CdTe$ , aqui mostramos magnitude da anisotropia giromagnética em escala de cores, apresentada como função cujo domínio é expandido através do espaço de parâmetros estruturais, ou seja, pelas larguras das camadas ativas ( $L_w$ ) e pela largura barreira de tunelamento ( $L_b$ ). . . . . 67
- 3.14 À esquerda temos uma representação esquemática de um sistema assimétrico multicamadas, onde a quebra da simetria de inversão no espaço decorre de uma barreira lateral composta por um material isolante. À direita temos o perfil correspondente para o potencial da banda de condução. . . . . 68
- 3.15 Considerando multicamadas do tipo *Isolante/InSb/CdTe/InSb/CdTe*, à esquerda vemos a anisotropia giromagnética e as energias permitidas para elétrons, como funções da largura da barreira de tunelamento ( $L_b$ ). À direita vemos a posição do centro da órbita ciclotrônica no painel superior, também como função da largura da barreira. Variamos gradativamente a largura das camadas ativas ( $L_w$ ), em unidades de  $0.2\text{ nm}$ . À direito, no painel inferior ilustramos o potencial da banda de condução e os parâmetros estruturais  $L_w$  e  $L_b$ . . . . . 69

## 1 INTRODUÇÃO

Em 1970, Esaki e Tsu iniciaram uma revolução de cunho científico e tecnológico, decorrente de estudos pioneiros sobre as assim chamadas super-redes cristalinas, formadas por camadas intercaladas entre materiais compostos por ligas semicondutoras distintas. Com o aprimoramento das técnicas de produção dos materiais nanoestruturados e o advento de novos sistemas de baixa dimensionalidade, houve um enorme avanço na física dos semicondutores e no desenvolvimento de dispositivos correlatos. Entre as diferentes técnicas de produção de nanoestruturas, a epitaxia por feixe molecular (MBE) é uma das mais conhecidas. Tal técnica possibilita produzir um determinado material, intercalando camadas cujas espessuras são controladas em uma determinada direção, conhecida como direção de crescimento. No caso da liga GaAs, a substituição de uma parcela de átomos de gálio (Ga) por átomos de alumínio (Al) ocasiona o alargamento do *gap* de energia, possibilitando a produção de heteroestruturas formadas por heterointerfaces do tipo  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ , onde as camadas de GaAs constituem os poços quânticos e as camadas de AlGaAs as barreiras, sendo que as espessuras das barreiras e dos poços dependem do número de monocamadas depositadas durante o processo de crescimento.

Na década de oitenta, o contínuo aprimoramento das técnicas de produção de heteroestruturas levou à descoberta magnetoresistência gigante (GMR) ([BAIBICH et al., 1988](#)) - uma variação radical da resistência elétrica em resposta a um campo magnético aplicado, observada em estruturas formadas por camadas intercaladas entre materiais magnéticos e não-magnéticos - de onde surgiram dispositivos alternativos tais como filtros, válvulas e diodos spin, com o intuito de atender demandas oriundas de setores considerados críticos, cujo o limite plausível de desenvolvimento por vias convencionais já foi aparentemente alcançado ([FERT, 2008](#)). Portanto, a spintrônica se apresenta como alternativa promissora, sendo que seus benefícios estão atrelados à compreensão aspectos que se relacionam ao grau de liberdade intrínseco (denominado spin) de portadores em meios materiais. Dessa forma, a manipulação ativa de propriedades dependentes de spin, em materiais artificialmente produzidos para tanto, abre espaço para uma nova classe de dispositivos, com especial destaque para os transistores de spin ([DATTA; DAS, 1990a; TING; CARTOIXA, 2002; SCHLIEMANN et al., 2003; LUSAKOWSKI et al., 2003](#)), entre os principais prospectos.

Possivelmente, o dispositivo mais importante na eletrônica é o transistor convencional, que está presente em quase todos os dispositivos eletrônicos atuais. Em uma ambiciosa proposta no campo da spintrônica, Datta e Das ([DATTA; DAS, 1990a](#)) propuseram um análogo do transistor que se baseia no grau de liberdade de spin do elétron, visando benefícios como a redução do consumo de energia (com a redução da dissipação de energia), além de uma maior eficiência no processamento da informação. Entretanto, a manipulação

do spin de elétron envolve importantes questões ainda pendentes, como mecanismos de relaxação decorrentes da interação spin-órbita, que acopla o momento linear com o spin do portador. Conforme discutido por Zutic, Fabian e Das Sarma ([ZUTIC et al., 2004](#)), é de fundamental interesse conhecer quais estruturas possibilitam a mitigação dos mecanismos responsáveis pela relaxação e decoerência da informação associada ao spin do portador. Em tal contexto, são promissores sistemas que apresentam texturas de spin com um longo tempo de vida, devido à supressão de um importante mecanismo de relaxação de spin ([CARTOIXÀ et al., 2005](#); [DYAKONOV; PEREL, 2014](#)). Todos esses aspectos são importantes para implementação de um transistor de spin.

Do ponto de vista da física fundamental, manipular o spin requer que ele seja distingível, ou seja, para manipular o spin é necessário romper a chamada degenerescência de spin, como, por exemplo, por meio de um campo magnético externo, como no efeito Zeeman, ou através da interação spin-órbita, cujo efeito está associado a sistemas/estruturas que rompem a simetria de inversão espacial, como no caso dos efeitos Dresselhaus e Rashba, onde o potencial do cristal (ou bulk) e o confinamento quântico mesoscópico (ou estrutural) podem ser interpretados por meio de uma transformação de Lorentz, como um campo magnético (então dito efetivo) cujo módulo depende da orientação cristalográfica ([WINKLER, 2003](#); [WINKLER, 2004](#)).

De forma sucinta, podemos dizer que os estados permitidos para elétrons em sólidos cristalinos são duplamente degenerados, devido à presença simultânea das simetrias de inversão no tempo e de inversão no espaço. Assim, o problema pode ser abordado de duas formas:

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

A quebra da degenerescência de spin promovida pela influência de um campo magnético externo é conhecida como efeito Zeeman anômalo, e é caracterizada pela quantidade física adimensional que determina a separação dos níveis de energia para estados eletrônicos com spins opostos - ou seja, é caracterizada por um fator giromagnético, dito então fator  $g$  de spin. Para um elétron livre (no vácuo), o fator  $g$  de spin possui um valor muito próximo de 2, sendo que as pequenas correções (em torno de 2) são obtidas por meio da eletrodinâmica quântica. Por outro lado, para elétrons em sólidos cristalinos, como cristais semicondutores, o fator  $g$  de spin é fortemente renormalizado pela interação do elétron

com a rede cristalina (ou *bulk*), podendo variar drasticamente de acordo com o material, onde passa a ser conhecido como fator g efetivo. Em heteroestruturas, além de depender do material que compõem o *bulk*, o fator g efetivo é também corrigido por efeitos oriundos do confinamento quântico (ou potencial mesoscópico). A dependência do fator g efetivo com a largura das camadas ativas (descritas como poços quânticos) e sua relação com os materiais específicos que compõem as camadas tem sido exaustivamente investigada. Contudo, para entendermos os fundamentos sob os quais se sustenta a formulação que aqui será utilizada, será necessário compreender alguns dos efeitos essenciais relacionadas ao spin do elétron, como a interação spin-órbita e o efeito Zeeman.

## 1.1 Interação spin-órbita

Inicialmente, podemos interpretar o acoplamento spin-órbita de maneira simples e intuitiva<sup>1</sup>, no contexto atômico. Considerando que há movimento relativo entre o núcleo e o elétron, um campo magnético oriundo do movimento do núcleo atua em um referencial fixo sobre a posição do elétron. De acordo com a eletrodinâmica clássica, tal campo magnético,  $\mathbf{B}_{so}$ , é visto como resultado da transformação de Lorentz efetuada sobre o campo elétrico que é produzido pelo núcleo, isto é,

$$\mathbf{B}_{so} = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E}(r), \quad (1.1)$$

onde  $-\mathbf{v}$  é a velocidade de deslocamento do núcleo. Observe que a magnitude do campo elétrico, que é produzido pelo núcleo e presenciado pelo elétron, depende apenas do módulo da distância relativa entre ambos, que é indicada por  $r$ . Reciprocamente, pode-se dizer que o campo elétrico produzido pelo núcleo é visto pelo elétron (em um sistema referencial em repouso), como um campo magnético efetivo  $\mathbf{B}_{so}$ . Então o momento magnético intrínseco  $\boldsymbol{\mu}_B$  do elétron deverá assumir uma posição de alinhamento ou anti-alinhamento em relação à  $\mathbf{B}_{so}$ , e o hamiltoniano que descreve essa interação e a separação energética para estados com spins opostos será dado por

$$H_{so} = -\boldsymbol{\mu}_B \cdot \mathbf{B}_{so} = -\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \left( \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{E}}{2m_0 c^2} \right), \quad (1.2)$$

onde  $\mu_B = e\hbar/2m_0$  é o magnetón de Bohr,  $m_0$  é a massa do elétron livre,  $e$  a carga do elétron e  $\hbar$  é a constante de Planck. Note ainda que  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  são as matrizes de Pauli<sup>2</sup>,  $c$  é a velocidade da luz,  $\mathbf{p}$  é o momento do elétron e  $\mathbf{E}$  é o campo elétrico interno

<sup>1</sup>Os argumentos aqui expostos explicam qualitativamente a interação SO, contudo, não são quantitativamente consistentes, pois negligenciam a aceleração do elétron e, por conseguinte, de seu referencial. Como consequência, a energia associada ao acoplamento SO é reduzida pela metade.

<sup>2</sup>Matrizes de Pauli:  $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$

(radial) produzido pelo núcleo do átomo. Na Eq. 1.2, considere ainda que o denominador  $2m_0c^2$  corresponde à separação energética (ou *gap*) entre o elétron e o pósitron, denominado como *gap* de Dirac (que é da ordem de MeV), e que fator 2 (no denominador) corresponde ao fator de Thomas, conforme discutido na Ref. ([KROEMER, 2004](#)).

A Eq. 1.2 pode ainda ser escrita na seguinte forma:

$$H_{so} = - \left( \frac{\hbar}{2m_0c^2} \right)^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla \mathbf{u}(\mathbf{r})) = -\lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla \mathbf{u}(\mathbf{r})), \quad (1.3)$$

onde  $E(\mathbf{r}) = \nabla \mathbf{u}(\mathbf{r})$ , com  $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = -Ze^2/r$ , é o campo elétrico percebido pelo elétron, donde vemos que quanto maior número atómico ( $Z$ ), maior será a contribuição (energética) do acoplamento spin-órbita. Adicionalmente, nota-se que o hamiltoniano  $H_{so}$  é inversamente proporcional à  $2m_0c^2 \simeq 1\text{MeV}$ , que é a energia correspondente ao *gap* de Dirac. Para compreendermos os efeitos do acoplamento spin-órbita no contexto dos sólidos cristalinos e heteroestruturas, é fundamental a compreensão do conceito de relação (ou diagrama) de dispersão, que serve de base para a construção e para o entendimento da estrutura eletrônica de sólidos, tendo ainda aplicações em diversos outros campos da Física. Sabe-se que o movimento ondulatório em diferentes meios traz consigo efeitos interessantes; particularmente, em Física da Matéria Condensada, o fenômeno ondulatório pode se manifestar por meio de espectros energéticos contínuos e discretos, podendo ainda haver combinações de ambos. São inúmeros os casos donde surgem propriedades interessantes como consequência da combinação de estados com espectros discretos e contínuos. Em particular, a estrutura eletrônica de sólidos cristalinos e heteroestruturas se baseia no conceito de relação de dispersão, que fornece a energia permitida para o portador de carga como função de seu vetor de onda<sup>3</sup>. Em sólidos cristalinos, os níveis de energias, dados em termos das relações de dispersão, se agrupam formando bandas de energia no espaço  $k$ , ou espaço recíproco. Assim, em um sólido cristalino, a forma com que as bandas de energia são preenchidas por elétrons determina propriedades fundamental do meio. Por exemplo, em isolantes e semicondutores puros a temperatura zero, as bandas de mais baixa energia são preenchidas, obedecendo ao princípio de exclusão de Pauli, enquanto as bandas mais altas (de maior energia) permanecem vazias. As bandas de condução e valência são separadas por um intervalo de energia proibido conhecido como *gap* fundamental. Em semicondutores, o valor de *gap* energético fundamental pode variar de zero até poucos eV.

Pode-se utilizar a teoria de perturbação  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  no estudo do efeito do acoplamento spin-órbita na diagramação das bandas de energia de materiais semicondutores; em termos

---

<sup>3</sup>Essa informação pode ser guardada, em sua totalidade, em uma região limitada do espaço  $k$  (ou espaço recíproco), chamada primeira zona de Brillouin (veja, por exemplo, ([ASHCROFT; MERMIN, 1976](#))).

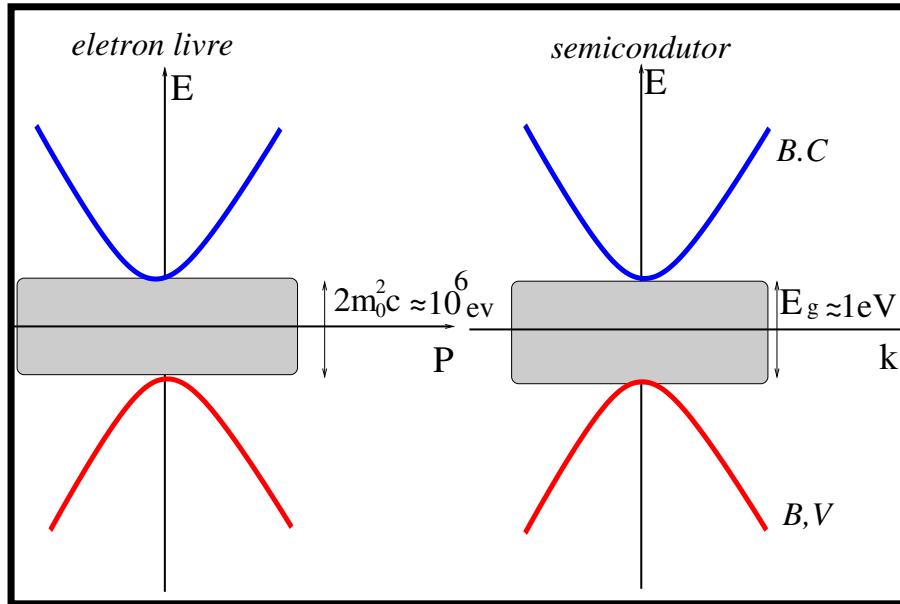


Figura 1.1 - Representação esquemática do *gap* de Dirac (para o elétron livre) e do *gap* de energia de um semicondutor. Fonte: elaboração própria do autor.

de analogia, é como se o fator  $2m_0c^2$  fosse substituído pelo *gap* dos diferentes materiais semicondutores (que são de alguns poucos eV), como é mostrado de forma pictórica na Fig. 1.1. A seguir, vamos discutir diferentes formas de remoção da degenerescência de spin de níveis energéticos em sólidos cristalinos de heteroestruturas.

## 1.2 Remoção da degenerescência de spin em cristais e heteroestruturas

Em cristais que possuem um centro de inversão espacial, a degenerescência de spin dos estados eletrônicos não é removida pela interação SO. A simetria de reversão temporal garante que um estado com um dado vetor de onda  $k$  e spin para cima (up), tenha a mesma energia que um estado com um vetor de onda  $-k$  e spin para baixo (down), ou seja,  $E_{\uparrow}(+k) = E_{\downarrow}(-k)$ , relação conhecida como degenerescência de Kramers. Portanto, em cristais que apresentam centro de inversão no espaço, os estados eletrônicos, para qualquer dado  $k$ , são pelo menos duplamente degenerados, mesmo na presença do acoplamento spin-órbita, como mostrado na Fig. 1.2.

No entanto, em cristais que não são centrossimétricos, como por exemplo, as ligas semicondutoras GaAs, InAs e InSb entre outras, a degenerescência de spin dos estados eletrônicos com  $k \neq 0$  é então removida pela interação spin-órbita, isto é,  $E_{\uparrow}(+k) \neq E_{\downarrow}(k)$ , mesmo na ausência de qualquer campo magnético externo. Tais separações energéticas, por spin, com campo magnético externo nulo, podem ser interpretadas como derivadas de

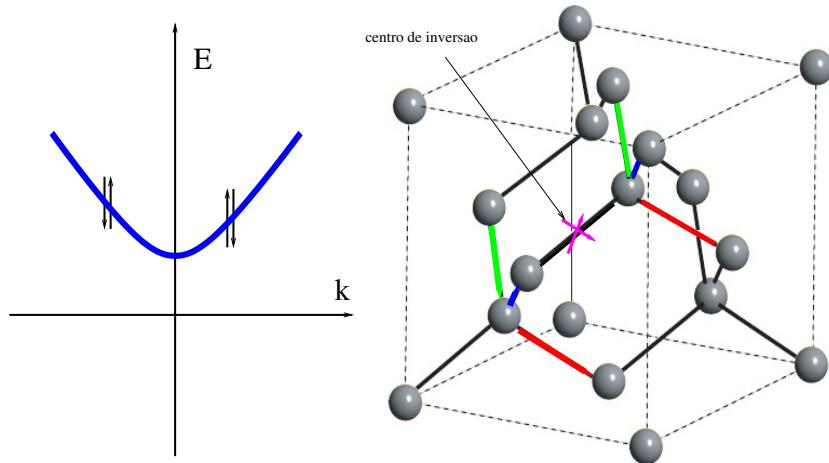


Figura 1.2 - Relações de dispersão degeneradas por spin, para estruturas cristalinas que apresentam um centro de inversão no espaço. Fonte: elaboração própria do autor.

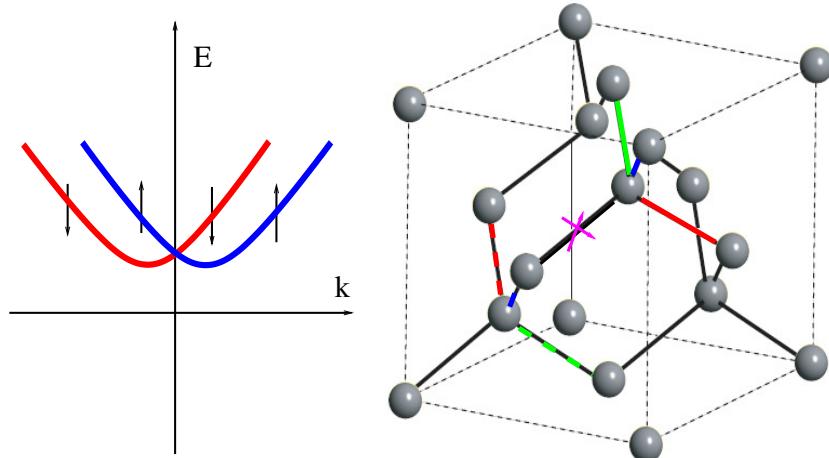


Figura 1.3 - Quebra da degenerescência das relações de dispersão para estados com spins opostos em cristais que não apresentam um centro de inversão no espaço. Fonte: elaboração própria do autor.

um campo elétrico interno do cristal volumétrico, que é visto pelo elétron em movimento, como um campo magnético (então dito efetivo), efeito conhecido como acoplamento SO de Dresselhaus ([DRESSELHAUS, 1955](#)), ou *bulk inversion asymmetry* (BIA), exemplificado esquematicamente na Fig 1.3. Assim, embora um elétron da banda de condução em um semicondutor não experimente (diretamente) a atração nuclear, como ocorre em um átomo, ele ainda está sujeito à campos elétricos internos do sistema, que podem ter distintas origens. Em heteroestruturas semicondutoras, em especial, pode haver um campo elétrico mesoscópico/estrutural resultante ao longo do sistema, devido à descontinuidades do potencial da banda de condução ou mesmo por influência de campos externos, que dão origem a outra contribuição da interação SO, chamada Rashba, que é então derivada da

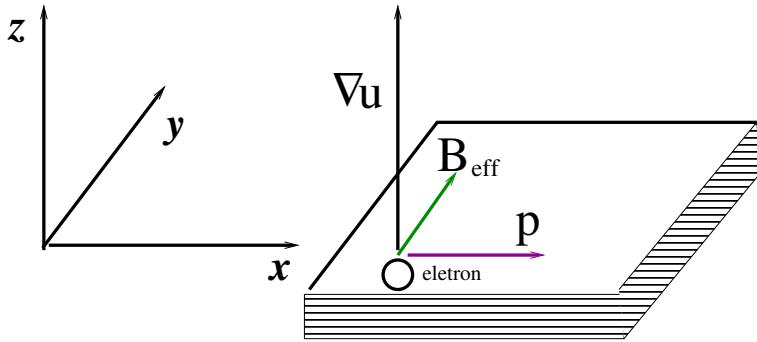


Figura 1.4 - Eixos das coordenadas espaciais  $x$ ,  $y$  e  $z$ , com a representação de um sistema quase-bidimensional ao lado, tomando  $z$  como direção de crescimento/confinamento. Mostra a situação de um elétron que se move com momento  $p$ , e que percebe o campo elétrico com origem no gradiente do potencial mesoscópico ( $\nabla u$ ), como um campo magnético efetivo, denotado por  $B_{eff}$ .

assimetria de inversão de estrutura (SIA), ou seja, do potencial mesoscópico. Portanto, em heteroestruturas semicondutoras III-V, o Hamiltoniano de interação SO pode ser escrito em termos da superposição das contribuições de Rashba e Dresselhaus, conforme segue:

$$H_{so} = \underbrace{\alpha(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)}_{Rashba} + \underbrace{\gamma(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y)}_{Dresselhaus}. \quad (1.4)$$

O coeficiente  $\alpha$  está, portanto, relacionado com o campo elétrico interno de origem estrutural/mesoscópico, enquanto que o coeficiente  $\gamma$  representa uma propriedade do cristal volumétrico (ou *bulk*). São de particular importância, tanto no desenvolvimento de novos dispositivos spintrônicos quanto no entendimento de fenômenos físicos fundamentais, sistemas com interação SO forte, que favorecem a manipulação do spin eletrônico através de potenciais externos, como, por exemplo, na proposta do transistor de spin (DATTA; DAS, 1990b). Geralmente, a interação SO forte é derivada de um acoplamento Rashba forte, caso em que este é preponderante sobre a contribuição de Dresselhaus. São diversas as conexões do efeito Rashba com vertentes atuais de pesquisa (MANCHON et al., 2015), em particular, com estados topológicos da matéria (DMYTRUK; KLINOVAYA, 2018; LUTCHYN et al., 2010).

O acoplamento Rashba surge, por exemplo, em heteroestruturas onde o potencial de confinamento não apresenta simetria especular, ou seja, simetria de inversão espacial em relação ao plano perpendicular ao eixo (ou direção) de crescimento. Considere, então, o eixo  $z$  como direção de crescimento/confinamento, com um respectivo gradiente de potencial apontando na direção  $z$ , e que os portadores - elétrons confinados pelo potencial da banda de condução - estão livres para mover-se no plano  $x - y$ , como mostrado na Fig. 1.4. Neste caso, o Hamiltoniano de Rashba pode ser escrito da seguinte forma:

$$H_R = \alpha \sigma \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{e}_z), \quad (1.5)$$

onde  $\mathbf{e}_z$  é o versor que indica o eixo de crescimento e  $\alpha$  é o parâmetro de acoplamento Rashba. Este parâmetro depende de diferentes detalhes da estrutura considerada, uma vez que o campo elétrico que pode ter origem tanto no potencial de confinamento estrutural, quanto em campos externos, ou até mesmo campos de polarização piezoelétrica, como ocorre no caso das ligas de nitretos semicondutores (GaN, InN, InGaN, entre outras), conforme discutido por Litvinov ([LITVINOV, 2016](#)) e mais recentemente ([FU et al., 2020](#)). Além disso, em semicondutores do grupo *IV – VI*, assimetrias abruptas do potencial da banda de condução são consideradas através de condições de contorno dependentes de spin ([HASEGAWA; SILVA, 2003](#)).

No caso de heteroestruturas semicondutoras III-V, é comum a utilização da teoria de massa efetiva de múltiplas bandas na obtenção do parâmetro de acoplamento Rashba; em tal contexto, são tradicionais os modelos  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  tipo Kane de três níveis (ou oito bandas), como utilizado nas Refs. ([SILVA et al., 1994](#); [SILVA et al., 1997](#)), que inclui a interação da banda de condução com as bandas de buraco pesado (HH), buraco leve (LH) e *split-off* (SO), conforme a representação esquemática mostrada na Fig. 1.5, à direita. Uma dedução muito conhecida, derivada do modelo de Kane de oito bandas e da aproximação de função envelope, propõem a seguinte expressão para o acoplamento Rashba:

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m^* E_g} \frac{\Delta}{(E_g + \Delta)(3E_g + \Delta)} e \left\langle \frac{\partial V}{\partial z} \right\rangle, \quad (1.6)$$

onde  $E_g$  e  $\Delta$  são energias de separação das bandas no ponto  $\Gamma$ , como mostrado na Fig. 1.5 (à direita),  $m^*$  é a massa efetiva da banda de condução e  $\left\langle \frac{\partial V}{\partial z} \right\rangle$  representa o módulo do campo elétrico, devido à assimetria do potencial mesoscópico/estrutural, conforme mostrado esquematicamente na Fig. 1.5, à esquerda. Valores típicos do coeficiente Rashba em heteroestruturas compostas por ligas semicondutoras III-V estão entre 0.6 e  $4 \times 10^{-11} eVm$ , que corresponde a uma separação energética, ou *spin-splitting*, entre 1 e 10 meV. De acordo com a Eq. 1.6, e como verificado experimentalmente, o parâmetro de acoplamento Rashba é proeminente em heteroestruturas de gap estreito, compostas, por exemplo, por InSb e InAs<sup>4</sup>. Adicionalmente, sabe-se que outros detalhes estruturais são importantes na determinação do coeficiente Rashba, como efeitos de interface e tunelamento quântico ou penetração de barreiras ([SANDOVAL et al., 2009](#); [SANDOVAL et al., 2011](#)).

O efeito Rashba para elétrons (na banda de condução) em heteroestruturas III-V pode ser

---

<sup>4</sup>Veja, por exemplo, a discussão na Ref. ([WINKLER, 2003](#)).

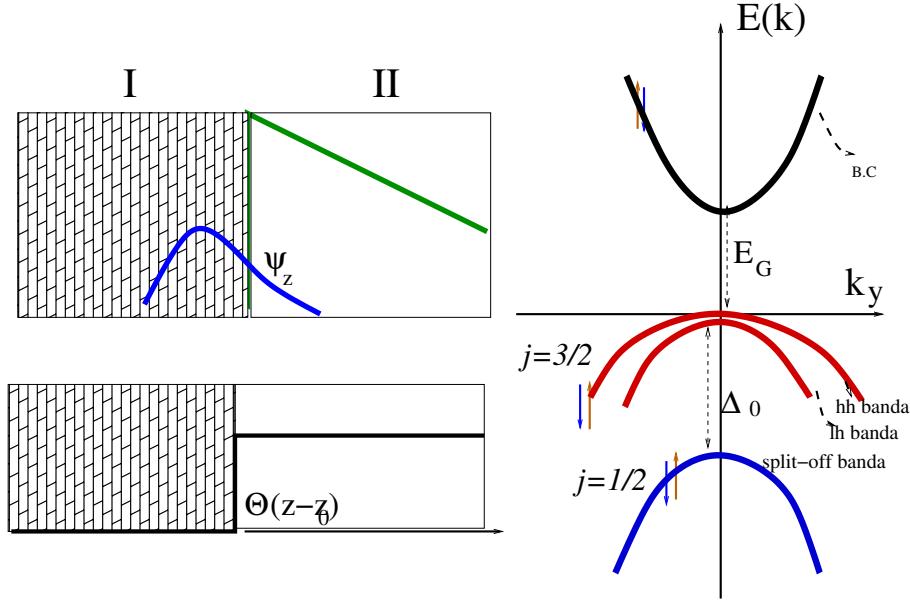


Figura 1.5 - À esquerda, mostra a diagramação da banda de condução e a função de onda eletrônica, no painel superior. No painel inferior, mostra apenas a descontinuidade do potencial da banda de condução, conforme a interface entre os materiais que compõem a heteroestrutura. À direita, mostra, de forma genérica, a estrutura de bandas de energia em uma liga semicondutora III-V, nas vizinhanças do ponto  $\Gamma$ , restrita à primeira banda de condução (CB), e as bandas de valência: buraco pesado (HH), buraco leve (LH) e *split-off* (SO).  $E_g$  e  $\Delta$  são energias de separação das bandas no ponto  $\Gamma$ . Fonte: elaboração própria do autor.

inicialmente interpretado de maneira muito simples, através de um Hamiltoniano efetivo bidimensional, ou seja, para elétrons livres no plano  $x-y$  e  $z$  como direção de confinamento, conforme segue

$$H_{CB} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \mathbf{1} + \alpha \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \times \mathbf{e}_z \quad (1.7)$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} & \alpha (k_y + ik_x) \\ \alpha (k_y - ik_x) & \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \end{bmatrix} \quad (1.8)$$

onde  $\mathbf{k}_{\parallel} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$ . A diagonalização de 1.8 é trivial, e os autovalores são tais que:

$$E_{\pm}(k_{\parallel}) = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \pm \alpha k_{\parallel}. \quad (1.9)$$

Portanto, em primeira aproximação, as relações de dispersão de elétrons em heteroestruturas, tomando  $z$  como direção de crescimento/confinamento, são duas parábolas deslocadas da origem, de forma que  $E_+(-k_{\parallel}) = E_-(+k_{\parallel})$ , como mostrado na Fig. 1.6. Note ainda que o parâmetro de acoplamento  $\alpha$ , que determina o afastamento das parábolas em relação à origem, depende de detalhes estruturais do sistema, como, por exemplo, expresso pela Eq.1.6. Este seria um modelo mínimo que já permitiria estudar a dependência do efeito

Rashba com parâmetros dos materiais experimentalmente conhecidos como  $E_g$ ,  $\Delta$  e  $m^*$ .

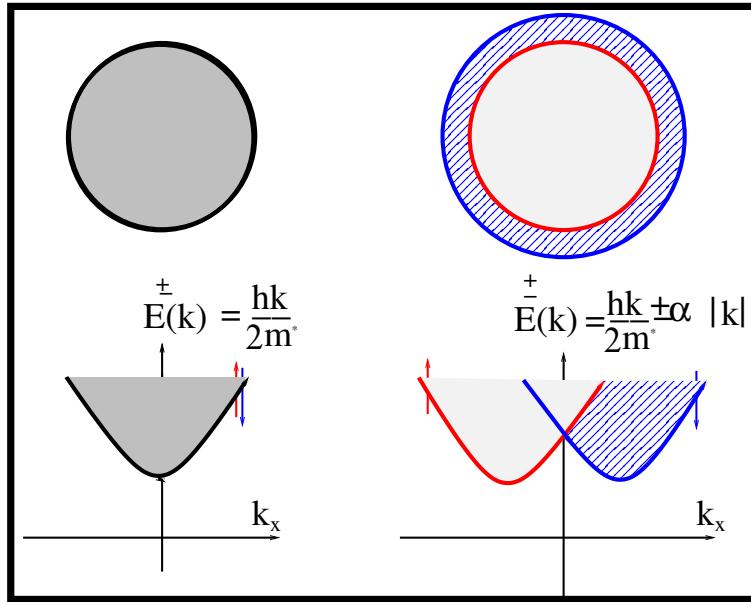


Figura 1.6 - À esquerda, mostra da relação de dispersão de um elétron livre, ou seja, uma parábola (em  $k_{||}$ ) e, acima, temos a projeção do nível de Fermi no plano  $k_x - k_y$ . Na figura à direita, apenas consideramos, adicionalmente, o acoplamento Rashba.

Assim, o efeito Rashba, oriundo da assimetria de inversão de estrutura, pode ser interpretado em termos de um campo magnético efetivo, dependente do vetor de onda, escrito da seguinte forma:

$$H_R = (\hbar/2) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_{eff}(\mathbf{k}), \quad (1.10)$$

onde

$$\mathbf{B}_{eff}(\mathbf{k}) = (2/\hbar) \alpha \mathbf{k} \times \mathbf{e}_z; \quad (1.11)$$

note ainda que  $\mathbf{B}_{eff}$  está restrito ao plano  $k_x - k_y$ , como mostrado na Fig. 1.7.

Entretanto, a mais conhecida forma de remoção ou quebra da degenerescência de spin de estados eletrônicos se dá por meio da influência de campos magnéticos externos, com a quebra da simetria de reversão temporal, como ocorre no efeito Zeeman. Neste caso, o momento magnético intrínseco  $\boldsymbol{\mu}_B$  do elétron deverá assumir uma posição de alinhamento ou anti-alinhamento em relação ao campo magnético externo  $\mathbf{B}$ , e o Hamiltoniano que descreve essa interação, com a respectiva separação energética para estados com spins opostos, é tal que:

$$H_Z = -\boldsymbol{\mu}_B \cdot \mathbf{B}. \quad (1.12)$$

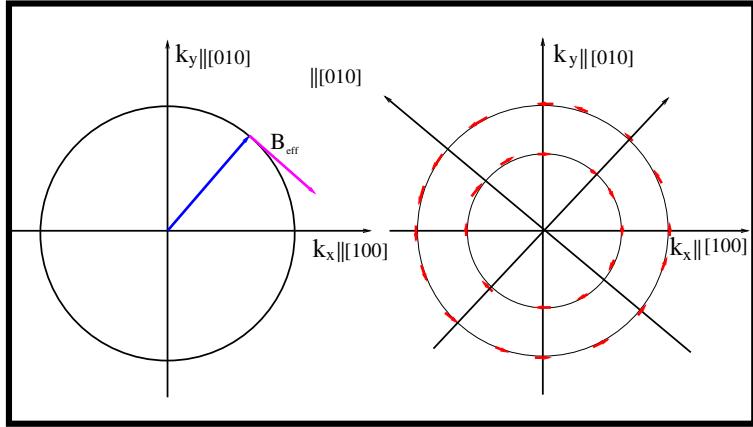


Figura 1.7 - Campo magnético efetivo dependente do vetor de onda, oriundo da assimetria de inversão estrutural ou efeito Rashba.

Lembrando que  $\mu_B = -g_e\mu_B \mathbf{s} \simeq -\frac{e}{2m_0} \boldsymbol{\sigma}$ , pois  $g_e \simeq 2$ , e  $\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$  é o momento angular de spin do elétron. 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. Contudo, o problema de um elétron sob a influência de um campo magnético apresenta outros aspectos fundamentais. Em especial, o problema em questão foi originalmente resolvido por Landau e detalhes adicionais da solução que apresentaremos a seguir, podem ser encontrados em seu livro, escrito com a co-autoria de Lifshitz ([LANDAU; LIFSHITZ, 1981](#)). Inicialmente, considere que, sob a influência de um campo magnético externo  $\mathbf{B}$  deve-se levar em conta, na formulação Hamiltoniana, o momento generalizado  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A}$ , onde  $\mathbf{A}$  é o potencial vetor. Vamos escolher o potencial vetor de tal forma que  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  e  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = B \mathbf{e}_z$ , isto é, o campo magnético é constante e uniforme, e aponta na direção do eixo  $z$ . Tomando  $\mathbf{A} = -B(y, 0, 0)$  como uma possível escolha, é simples mostrar que o Hamiltoniano será dado por:

$$H = \frac{1}{2m_0} \left[ \left( \hat{p}_x - \frac{eB}{c}y \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] - \frac{\mu_B}{2} \sigma_z g_e B. \quad (1.13)$$

O Hamiltoniano 1.13 é analiticamente solúvel, com energias dadas por

$$E_n^\pm(k_z) = (n + 1/2) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} \mp \frac{\mu_B}{2} g_e B. \quad (1.14)$$

Note que o primeiro termo (do lado direito) da Eq. (1.14) expressa a quantização do movimento no plano perpendicular ao campo magnético, em níveis discretos tais que  $n = 0, 1, 2, \dots$ , interpretados como níveis permitidos para um oscilador harmônico que oscila com frequência  $\omega_c = \frac{eB}{m_0 c}$ , conhecidos como níveis de Landau. O segundo termo expressa uma dispersão parabólica para a componente  $z$  do vetor de onda e o terceiro

termo representa a interação Zeeman. A Fig. 1.8 mostra, no espaço recíproco, a separação de um nível de Landau em duas componentes, em decorrência do efeito Zeeman. As Eqs. (1.13) e (1.14) são centrais para o entendimento dos problemas abordados nesta tese. Ocorre que heteroestruturas semicondutoras bidimensionais, aqui já discutidas e objeto de nosso estudo, permitem a formação de níveis de Landau(-Zeeman) em termos efetivos, descritos por meio de equações do tipo de (1.13) e (1.14), definindo massa e fator g efetivos,  $m^*$  e  $g^*$ , em lugar de  $m_0$  e  $g_e$ ; um formalismo nestes moldes será introduzido no próximo capítulo. A seguir, introduziremos a fundamentação teórica utilizada.

A formação de níveis de Landau em heteroestruturas semicondutoras é uma das bases para a explicação do efeito Hall quântico inteiro, com profundas implicações no contexto moderno da Física da Matéria Condensada. O foco deste trabalho, contudo, está no fator g efetivo, com diferentes formas de promover/aprimorar a engenharia de spin usando nanomateriais - manipulando o fator g efetivo através do arranjo (ou arquitetura) de materiais em escala nanométrica. Atrelada ao controle/manipulação do efeito Zeeman, a assim chamada engenharia do fator g efetivo é fortemente motivada pela busca por estruturas hospedeiras de fases exóticas da matéria (LUTCHYN et al., 2018), além de desempenhar um papel-chave no desenho plataformas promissoras para uso em comunicações quânticas (KOSAKA et al., 2001) e mesmo computação quântica (SALIS et al., 2001). Em tal contexto, há um particular interesse por semicondutores que possuem um fator g efetivo elevado,

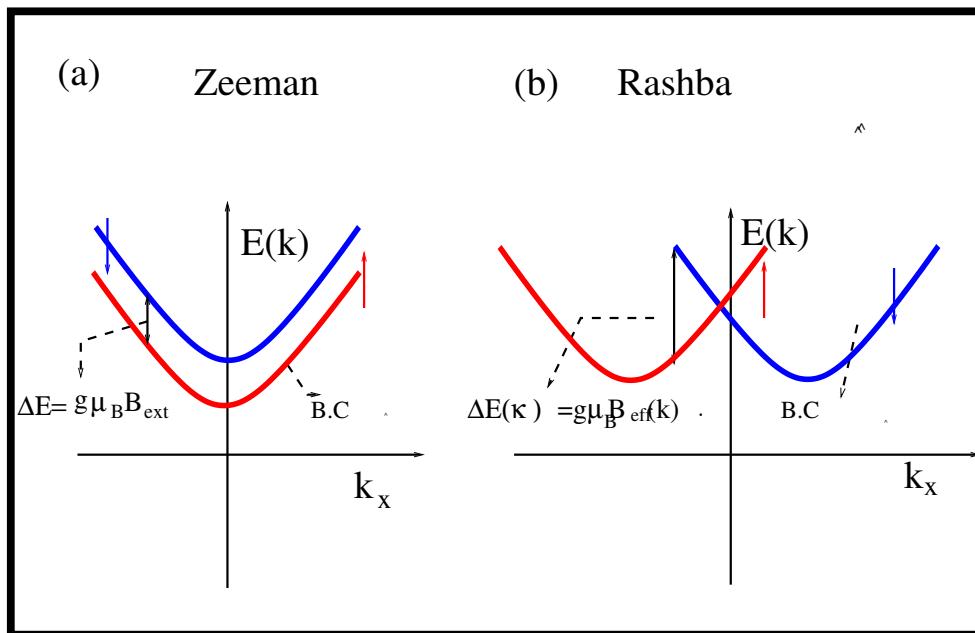


Figura 1.8 - Mostra a quebra degenerescênciade spin de um nível de Landau, em decorrência da interação Zeeman, resultando em duas parábolas idênticas separadas verticalmente. (b) Para efeito de comparação, mostra-se a quebra da degenerescênciapromovida pelo efeito Rashba.

que estão geralmente associados com menores valores do gap fundamental (como no InAs ou no InSb, entre as ligas semicondutoras III-V). Tais materiais viabilizam a quebra da degenerescência de spin dos portadores mesmo para campos magnéticos fracos, permitindo, por exemplo, preservar o caráter supercondutor de estruturas híbridas, compostas por supercondutores e semicondutores, que são materiais promissores na busca por estados exóticos da matéria. O comportamento do fator g efetivo em semicondutores volumétricos (bulk) é bem descrito pela fórmula de Roth, incluindo sua dependência com o gap fundamental (regra facilmente verificada para semicondutores de gap estreito, como o InSb e InAs).

Entretanto, ainda existem diversas questões incompreendidas relativas ao fator g eletrônico efetivo em nanoestruturas; em particular, como foi brevemente discutido, na presença de um campo magnético externo, a interação Zeeman efetiva apresenta uma anisotropia que pode ser diretamente associada à orientação que o campo magnético assume em relação à direção de crescimento da nanoestrutura; no caso de heteroestruturas bidimensionais, tal interação pode ser expressa em termos de um tensor g efetivo cujas componentes diagonais correspondem especificamente aos casos em que o campo magnético é transversal e longitudinal à direção de crescimento. Sabe-se também que o fator g efetivo para portadores confinados em tais estruturas pode ser fortemente renormalizado e alcançar valores que diferem significativamente do fator g de spin para o elétron no vácuo ( $g_e$ ), de forma que os efeitos de bulk e do potencial estrutural podem ser incorporados em uma descrição dita efetiva do sistema ([SANDOVAL et al., 2012](#); [SANDOVAL et al., 2016](#)) Utilizando tal formulação, foram investigadas as componentes do tensor g para elétrons em multicamadas compostas por diferentes ligas semicondutoras do tipo III-V, levando em conta o efeito de competição entre a assimetria de inversão estrutural (mesoscópica) e o efeito de tunelamento quântico entre camadas ativas do sistema. Foram consideradas multicamadas formadas pelas interfaces InP/InGaAs, AlSb/InAs e CdTe/InSb, para as quais analisamos teoricamente os diferentes mecanismos de renormalização do fator g efetivo, em um processo hierarquizado de correções do *bulk*, do confinamento mesoscópico, da assimetria de inversão estrutural e de tunelamento quântico.



## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 Método k.p

Um dos mais tradicionais métodos empregados em Física do Estado Sólido, o método **k.p** permite explorar as propriedades das bandas de energia nas vizinhanças dos pontos de alta simetria da zona de Brillouin<sup>1</sup>. Com este método, pode-se obter a estrutura de bandas em torno desses, a partir de um pequeno número de parâmetros, como, por exemplo, massa efetiva e o *gap* de energia do material, que podem ser determinados experimentalmente com boa precisão. Esse método foi inicialmente utilizado na interpretação de experimentos de ressonância ciclotrônica, como os reportados por Dresselhaus, Kip e Kittel ([DRESSELHAUS et al., 1955](#)). Em sua concepção mais básica, o método **k.p** fica restrito a subespaços com um número reduzido de bandas, sendo também muito utilizada a aproximação parabólica, que permite estudar propriedades ópticas e eletrônicas de materiais volumétricos (*bulks*), por meio de um método simples, transparente, com extensões diversas. Contudo, generalizações e modelos mais complexos, que incluem bandas remotas, efeitos de não parabolicidade, massas efetivas anisotrópicas, tensões intrínsecas da rede e mesmo a influência de campos externos, têm sido amplamente explorados e são atualmente bem conhecidos na literatura ([PIKUS, 1960](#)). São várias as virtudes do método **k.p**, entre as quais não podemos deixar de mencionar o baixo custo computacional, quando comparados à cálculos derivados da teoria do funcional da densidade, por exemplo. Além disso, o método **k.p** pode ser combinado ao formalismo da função envelope, permitindo o estudo de heteroestruturas, sendo este possivelmente um de seus triunfos, visto que o estudo de heteroestruturas ainda hoje representa um desafio científico principalmente no que concerne ao custo/tempo computacional. O método **k.p** se baseia no teorema de Bloch, e busca obter as soluções da equação de Schroedinger para estados eletrônicos sob a influência de um potencial periódico, isto é:

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (2.1)$$

onde,

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (2.2)$$

$\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  e  $\mathbf{a}_3$  são chamados de vetores primitivos e  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_3$  são números inteiros. Observe que qualquer ponto de rede com vetor posição  $\mathbf{R}$  pode ser obtido através de uma combinação linear dos vetores primitivos e, portanto, dizemos que vetores primitivos geram a rede, como mostrado Fig.[2.1](#). Procuramos, portanto, por uma solução da equação Schroedinger

---

<sup>1</sup>Para maiores detalhes veja, por exemplo, a Ref. ([ASHCROFT; MERMIN, 1976](#))

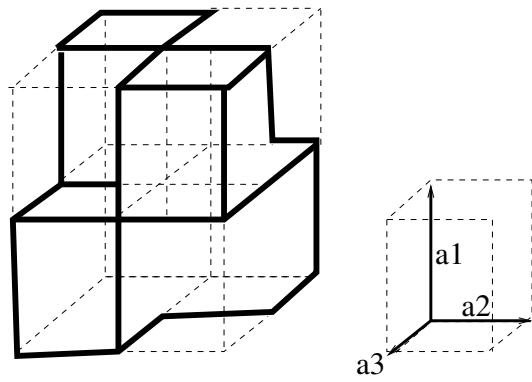


Figura 2.1 - Ilustração de um rede cristalina genérica obtida a partir dos vetores primitivos  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  e  $\mathbf{a}_3$ .

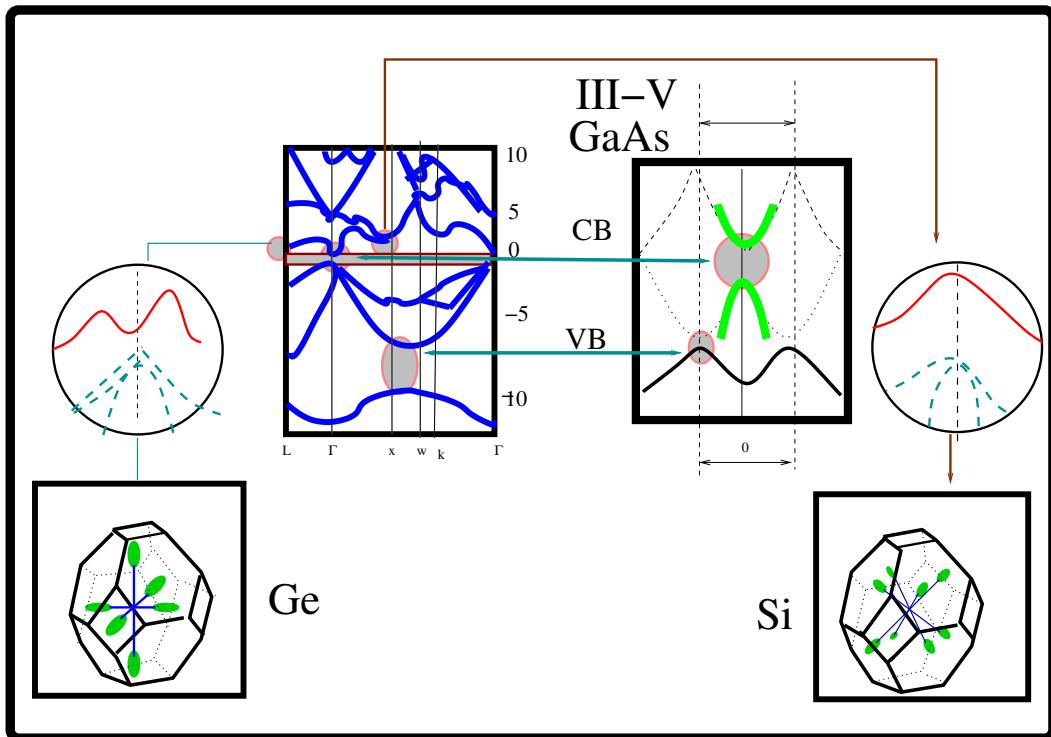


Figura 2.2 - Diferentes materiais semicondutores com seus correspondentes pontos de alta de simetria. Adaptado de ([CHELIKOWSKY; COHEN, 1974](#))

na qual  $V(\mathbf{r})$  satisfaz a condição imposta pela Eq. (2.1), de forma que:

$$H_0\Psi(\mathbf{r}) = \left[ \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k})\Psi(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Uma vez que estamos considerando um potencial com a periodicidade da rede, note que o hamiltoniano 2.3 deve ser invariante mediante a operação de translação espacial  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{R}$ . Então, as autofunções que procuramos, denotadas por  $\Psi(\mathbf{r})$ , também devem ser autoestados do operador de translação da rede cristalina e, segundo o teorema de Bloch,

podem ser escritas da seguinte forma:

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Substituindo a função de onda (2.4) no Hamiltoniano (2.3) e agrupando os termos, obtém-se a seguinte equação:

$$\left[ \frac{P^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}{m_0} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[ E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

A Eq. (2.5) é entendida como uma equação de autovalores para as autofunções  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , que são normalizadas no volume de uma célula unitária do cristal. Essa equação apresenta um número infinito de soluções com autovalores discretos segundo o índice  $\mathbf{k}$ . Para um valor fixo de  $\mathbf{k}$ , digamos  $\mathbf{k} = 0$ , a equação admite um conjunto completo de soluções. Considerando essas soluções como não perturbadas e  $\mathbf{k}$  como termo perturbativo, podemos obter por meio da teoria de perturbação de segunda ordem a seguinte expressão para energia:

$$E_n(\mathbf{k}) - E_n(0) = \sum_{\alpha,\beta} D_{\ell\ell'\alpha\beta} k_\alpha k_\beta = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left( \frac{1}{m^*} \right)_{\alpha,\beta} k_\alpha k_\beta \quad (2.6)$$

onde

$$D_{\ell\ell'\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \delta_{\ell\ell'} \delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\ell''} \frac{<\ell|\mathbf{p}_\alpha|\ell''><\ell''|\mathbf{p}_\beta|\ell'> + <\ell|\mathbf{p}_\beta|\ell''><\ell''|\mathbf{p}_\alpha|\ell'>}{E_\ell^{(0)} - E_{\ell''}^{(0)}} \quad (2.7)$$

com  $\alpha, \beta = x, y, z$ . Note que o tensor de massa efetiva é expresso em termos da matrix  $D_{\ell\ell'\alpha\beta}$ , ou seja

$$\left( \frac{1}{m^*} \right)_{\alpha,\beta} = \frac{1}{m_0} \delta_{\ell\ell'} \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{m_0} \sum_{\ell''} \frac{<\ell|\mathbf{p}_\alpha|\ell''><\ell''|\mathbf{p}_\beta|\ell'> + <\ell|\mathbf{p}_\beta|\ell''><\ell''|\mathbf{p}_\alpha|\ell'>}{E_\ell^{(0)} - E_{\ell''}^{(0)}} \quad (2.8)$$

A Eq. 2.8 nos diz que a renormalização da massa do elétron, em virtude a interação deste com o potencial cristalino, é em termos de contribuições de distintas bandas. Com relação aos resultados experimentais conhecidos para as massas efetivas, os resultados obtidos a partir do método  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  apresentam um melhor acordo para materiais que possuem um

Tabela 2.1 - Massas efetivas para diferentes ligas binárias semicondutoras (Ref. ([YU; CARDONA, 1996](#)))

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

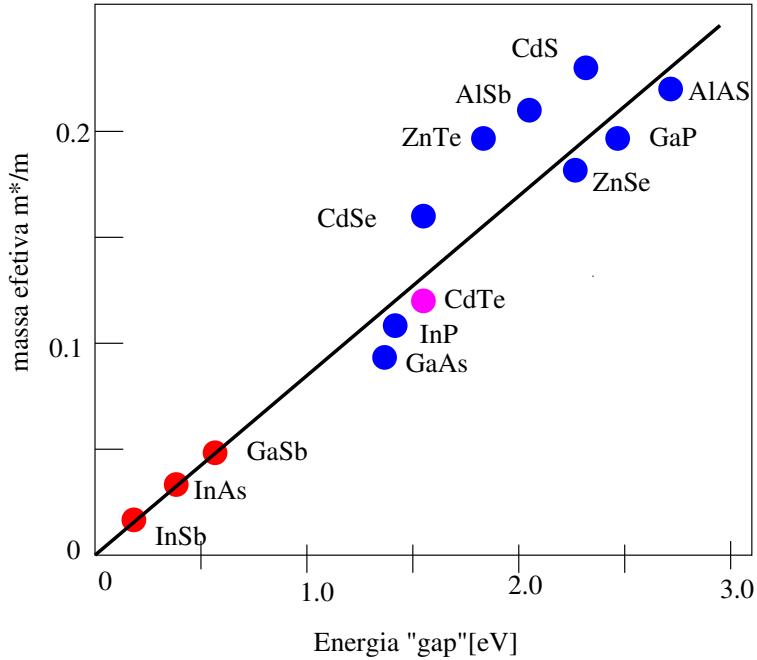


Figura 2.3 - Massas efetivas e *gaps* para diferentes materiais semicondutores.

menor *gap* de energia, como visto na Fig.2.3. Na medida em que o *gap* aumenta, faz-se necessária a inclusão de uma maior número de bandas. Observe ainda que uma pequena massa efetiva significa que a energia cinética aumenta rapidamente com o vetor de onda  $\mathbf{k}$  e pode se tornar comparável ao valor do *gap*, de forma que o termo perturbativo em  $\mathbf{k}$  pode alcançar rapidamente um valor maior do que a energia de separação entre os estados ditos não-perturbados e inviabilizar o cálculo perturbativo, definindo assim um limite de aplicabilidade do modelo.

### 2.1.1 Modelo de Kane

Este modelo permite estudar os efeitos decorrentes do acoplamento entre a banda de condução ( $E_c$ ) e as bandas de valência ( $E_v$ ) de forma exata. Inicialmente, vamos ignorar o efeito de spin e resolver o problema considerando três bandas, ou seja, a banda de condução e a banda de valência com sua degenerescência em  $\mathbf{k} = 0$ , isto é,

$$H_0|\lambda\rangle = E_{c,0}|\lambda\rangle, \quad (2.9)$$

onde  $\lambda = S, X, Y, Z$ , e o hamiltoniano  $H_0$  é dado por

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}). \quad (2.10)$$

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

$$u_{n,\mathbf{k}}(r) = \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} a_{\lambda} |\lambda\rangle, \quad (2.11)$$

e substituindo a Eq. 2.11 na Eq. 2.5 e efetuando o produto escalar por  $\langle \ell |$  com o intuito de obter os autovalores de energia, temos que

$$\langle \ell | \left( H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} a_{\lambda} |\lambda\rangle = \langle \ell | \left( E_n(\mathbf{k}) \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} a_{\lambda} |\lambda\rangle \right) \quad (2.12)$$

ou

$$\sum_{\lambda=S,X,Y,Z} \left\{ \left[ E_{\lambda}(k=0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_n(\mathbf{k}) \right] \delta_{\ell\lambda} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \langle \ell | \hat{\mathbf{p}} | \lambda \rangle \right\} a_{\lambda} = 0. \quad (2.13)$$

onde<sup>2</sup>

$$\langle S | \hat{\mathbf{p}} | X \rangle = \langle S | \hat{\mathbf{p}} | Y \rangle = \langle S | \hat{\mathbf{p}} | Z \rangle = i \frac{m_0}{\hbar} \sqrt{\frac{3}{2}} P. \quad (2.14)$$

Da Eq. (2.13) segue o seguinte sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} E_{c,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & i\sqrt{\frac{3}{2}} P k_x & i\sqrt{\frac{3}{2}} P k_y & i\sqrt{\frac{3}{2}} P k_z \\ i\sqrt{\frac{3}{2}} P k_x & E_{v,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 \\ i\sqrt{\frac{3}{2}} P k_y & 0 & E_{v,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 \\ i\sqrt{\frac{3}{2}} P k_z & 0 & 0 & E_{v,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} a_s \\ a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix} = E_{n,\mathbf{k}} \begin{bmatrix} a_s \\ a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix}$$

Do sistema acima, obtemos que

$$\begin{aligned} \left( E_{n,\mathbf{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E_{v,0} \right)^2 \left\{ \left( E_{n,\mathbf{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right)^2 - \left( E_{n,\mathbf{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) (E_{c,0} + E_{v,0}) \right. \\ \left. + E_{c,0} E_{v,0} - \left( \sqrt{\frac{3}{2}} k |P| \right)^2 \right\} = 0. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Da Eq. 2.15 obtemos facilmente os seguintes autovalores de energia:

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{HH}(\mathbf{k}) = E_{v,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (2.16)$$

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{CB}(\mathbf{k}) = \frac{E_{v,0} + E_{c,0}}{2} + \sqrt{\left( \frac{E_{c,0} - E_{v,0}}{2} \right)^2 + \left( \sqrt{\frac{3}{2}} k |P| \right)^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}}, \quad (2.17)$$

---

<sup>2</sup>Veja, por exemplo, a Ref. (DAVIES, 1998).

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{LH}(\mathbf{k}) = \frac{E_{v,0} + E_{c,0}}{2} - \sqrt{\left(\frac{E_{c,0} - E_{v,0}}{2}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{3}{2}}k|P|\right)^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}}. \quad (2.18)$$

Expandindo as Eqs. (2.16, 2.17, 2.18) em séries de Taylor, temos:

$$E_n(k) = E_n(k) + \sum_i \frac{\partial E_n}{\partial k_i} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} k_i + \dots \quad (2.19)$$

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{CB}(\mathbf{k}) = E_{c,0} + \frac{3}{2} \frac{k^2 |P|^2}{E_g} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (2.20)$$

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{LH}(\mathbf{k}) = E_{v,0} - \frac{3}{2} \frac{k^2 |P|^2}{E_g} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (2.21)$$

$$E_{n,\mathbf{k}} = E_{HH}(\mathbf{k}) = E_{v,0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, \quad (2.22)$$

Das Eqs.(2.19, 2.20, 2.21, 2.22), podemos obter as massas efetivas para as diferentes bandas de energia; essas massas são explicitamente dependentes do *gap*, sendo que este modelo é particularmente falho para buracos pesados, como pode-se verificar pela inspeção da massa desses estados (Eq. 2.22).

O termo de interação spin-órbita será então adicionado ao modelo de Kane (KANE, 1982), inicialmente considerando a conhecida expressão:

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m^2 c^2} (\nabla \mathbf{V} \times \mathbf{p}) \cdot \sigma, \quad (2.23)$$

com

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

onde  $\sigma$  são as matrizes de Pauli. Com introdução do termo de interação spin-órbita, o Hamiltoniano  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{k}) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} (\nabla \mathbf{V} \times \mathbf{p}) \cdot \sigma + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} (\nabla \mathbf{V} \times \mathbf{k}) \cdot \sigma. \quad (2.24)$$

Observando que último termo da Eq. (2.24) é proporcional  $\mathbf{k}$ , estimativas indicam que a contribuição desse termo corresponde a menos de um por cento do valor do hamiltoniano total do sistema.

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} (\nabla \mathbf{V} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.25)$$

ou

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) = H_0 + H_{so}. \quad (2.26)$$

Observe que  $H_{so}$  pode ser escrito em termos dos seguintes elementos de matriz:

$$(H_{so})_{11} = -iC \left( \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (2.27)$$

$$(H_{so})_{12} = -iC \left\{ \left( \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) - i \left( \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right\} \quad (2.28)$$

$$(H_{so})_{21} = -iC \left\{ \left( \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial y} \right) + i \left( \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right\} \quad (2.29)$$

$$(H_{so})_{22} = iC \left( \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (2.30)$$

Notemos que

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

Vamos considerar a Eq. 2.26 na base em que  $H_0$  é diagonal, ou seja,

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

Escrevendo as componentes  $b(\mathbf{r})$  e  $c(\mathbf{r})$  na base  $\{|S\rangle, |X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle\}$ ,

$$b(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} b_\lambda |\lambda\rangle, \quad (2.31)$$

$$c(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} c_\lambda |\lambda\rangle, \quad (2.32)$$

temos como resultado o seguinte sistema de equações:

$$\sum_{\lambda=S,X,Y,Z} \left[ (H_0 + (H_{so})_{11}) b_\lambda + (H_{so})_{12} c_\lambda \right] |\lambda\rangle = E \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} b_\lambda |\lambda\rangle, \quad (2.33)$$

$$\sum_{\lambda=S,X,Y,Z} \left[ (H_{so})_{21} b_\lambda + (H_0 - (H_{so})_{22}) c_\lambda \right] |\lambda\rangle = E \sum_{\lambda=S,X,Y,Z} c_\lambda |\lambda\rangle. \quad (2.34)$$

Nessa base, os elementos de matriz não nulos da interação SO são os seguintes:

$$\langle X | (H_{so})_{11} | Y \rangle = -\langle X | (H_{so})_{22} | Y \rangle = -i \frac{\Delta}{3},$$

$$\langle Y | (H_{so})_{12} | Z \rangle = \langle Y | (H_{so})_{21} | Z \rangle = -i \frac{\Delta}{3},$$

$$\langle X | (H_{so})_{12} | Z \rangle = -\langle X | (H_{so})_{21} | Z \rangle = \frac{\Delta}{3}.$$

Define-se o parâmetro com dimensão de energia, conhecido como *split-off*, e que corresponde à separação energética no ponto  $\Gamma$ , provocado pela interação spin-órbita, conforme segue

$$\Delta = -3i \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle X | \left( \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} \right) | Z \rangle. \quad (2.35)$$

Portanto, as Eqs. (2.33) e (2.34) podem ser expressas pelo seguinte sistema

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

De forma equivalente, pode-se escrever que

$$\left( \begin{array}{cc|c|c} E_c - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_c - E & & \\ \hline 0 & E_v - E & -i\Delta/3 & i\Delta/3 \\ & i\Delta/3 & E_v - E & \Delta/3 \\ & -i\Delta/3 & \Delta/3 & E_v - E \end{array} \right) \begin{pmatrix} b_s \\ c_s \\ b_x \\ c_y \\ b_z \\ c_x \\ b_y \\ c_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Diagonalizando a matriz acima obtemos a base de autovetores com a respectivas energias para  $\mathbf{k} = 0$ . Com a introdução da interação spin-órbita, teremos três grupos de estados degenerados, dois com energia igual a zero, correspondentes à energia da banda de condução no ponto  $\Gamma$ , sendo que essa energia não é afetada pela interação SO; além disso, temos quatro estados com energia  $E_v = E'_v + \Delta/3$  e dois com energia  $E_v = E'_v - \frac{2}{3}\Delta$ . Esses valores podem ser redefinidos de maneira simples, de acordo com a Fig. 2.4, onde vemos que os extremos das bandas de condução e de valência ocorrem no ponto  $\Gamma(\mathbf{k} = 0)$ , ponto para o qual costuma-se define o *gap* fundamental do semicondutor (embora hajam semicondutores com *gap* fora do ponto  $\Gamma$ ). Neste ponto, a interação spin-órbita quebra a

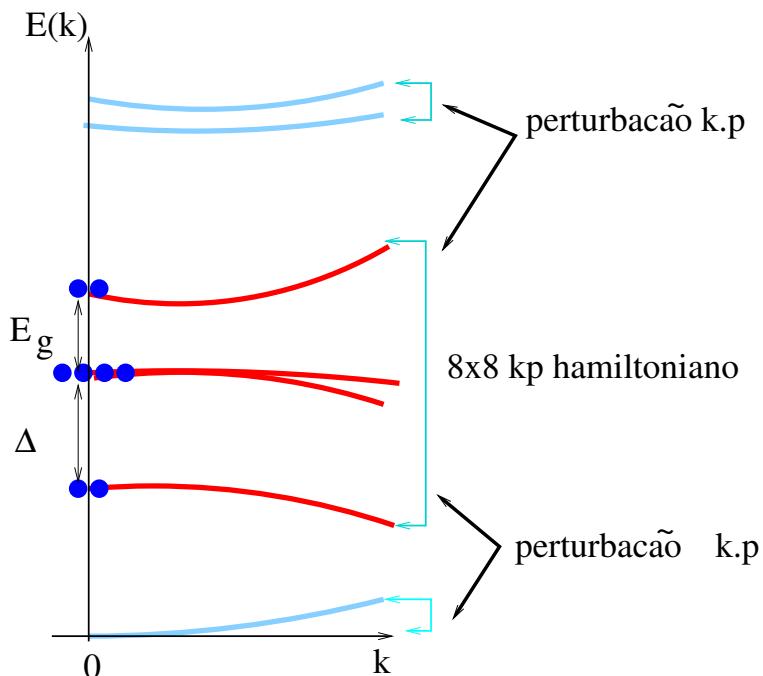


Figura 2.4 - Principais bandas de energia consideradas no método perturbativo  $\mathbf{k.p}$ .

degenerescência da banda de valência, dando origem a uma banda localizada mais abaixo na escala de energia, conhecida como *split-off*  $|SO\rangle$ . Por outro lado, para  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ , banda de valência se separa nas bandas de buraco pesado  $heavy-hole|HH\rangle$  e buraco leve  $light-hole|LH\rangle$ , como ilustrado Fig. 2.4.

### 2.1.2 Fator $g$ efetivo em semicondutores volumétricos

Nesta seção será utilizado o modelo de Kane para demonstrar a fórmula do fator  $g$  para materiais volumétricos (ou *bulks*), conforme o trabalho pioneiro desenvolvido por Roth e colaboradores (ROTH et al., 1959). Através do uso de teoria de perturbação de segunda ordem, será considerada presença de um campo magnético fraco. Com a introdução do campo magnético, deve-se adicionar ao hamiltoniano a contribuição energética dada pelo termo  $-\mu^* \mathbf{B}$ . Vamos partir do hamiltoniano eletrônico em um sólido cristalino na presença de um campo magnético externo é dado por

$$H = \frac{1}{2m_{\alpha\beta}^*}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 - g*\mu_B m_s B \quad (2.36)$$

A Eq. 2.36 considera a massa efetiva e o fator  $g$  efetivo, como produto da interação do elétron com a rede cristalina. A contribuição perturbativa é dada pelo termo  $H' = \frac{\hbar}{m}\mathbf{k}\cdot\mathbf{P}$ , e para considerar a interação SO, esta deve ser adicionada no vetor momento generalizado  $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4mc^2}(\sigma \times \nabla V)$ . Para obter a solução de hamiltoniano proposto, é necessário resolver a equação abaixo, resultante da aplicação da teoria de perturbação:

$$\sum_{\ell''} \left[ \sum_{\alpha\beta} D_{\ell\ell'\alpha\beta} k_\alpha k_\beta - E \delta_{\ell\ell'} \right] f_{\ell'} = 0, \quad (2.37)$$

onde  $\sum_{\alpha\beta} D_{\ell\ell'\alpha\beta} k_\alpha k_\beta$  é dado por

$$\sum_{\alpha\beta} D_{\ell\ell'\alpha\beta} k_\alpha k_\beta = \sum_{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \delta_{\ell\ell'} \delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\ell''} \frac{<\ell'|\mathbf{P}_\alpha|\ell''><\ell''|\mathbf{P}_\beta|\ell'>}{E_\ell^0 - E_{\ell''}^{(0)}} \right\}, \quad (2.38)$$

$\sum_{\alpha\beta}$  representa a soma sobre as componentes tal que  $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \sum_\alpha k_\alpha k_\alpha = \sum_{\alpha\beta} k_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta}$ . Na presença de um campo magnético, o operador  $\mathbf{p}$  deve ser generalizado por meio do acoplamento mínimo, ou seja,  $\mathbf{p} - e\mathbf{A}$ , onde  $\mathbf{A}$  é o vetor potencial magnético. Assim temos que

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

No contexto da Física da Estado Sólido, a Eq. 2.39 foi usada por Kohn e Luttinger, em seus trabalhos que tratam dos efeitos de campos magnéticos em semicondutores. Na

presença de um campo magnético, as componentes do vetor de onda não comutam (Eq. 2.40). No caso de um campo magnético na direção  $z$ , o potencial vetor magnético pode ser expresso da forma  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ . Neste caso, as componentes de vetor de onda na direção perpendicular à direção do campo magnético, ou seja  $k_x, k_y$ , não comutam, tendo como resultado a seguinte expressão:

$$[k_x, k_y] = \frac{ieB_z}{\hbar}, \quad (2.40)$$

sendo essas componentes dadas por  $k_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + eBy$  e  $k_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$ . Na busca de uma solução do problema em questão, convém reescrever a Eq. 2.37 como sendo composta por numa parte simétrica e outra anti-simétrica:

$$\sum_{\alpha\beta} D_{\ell\ell'\alpha\beta} k_\alpha k_\beta = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} D_{\ell\ell'\alpha\beta}^S \{k_\alpha, k_\beta\} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} D_{\ell\ell'\alpha\beta}^A [k_\alpha k_\beta] \quad (2.41)$$

onde são bem definidas as partes simétrica  $D_{\ell\ell'\alpha\beta}^S$  e anti-simétrica  $D_{\ell\ell'\alpha\beta}^A$ :

$$D_{\ell\ell'\alpha\beta}^S = \frac{1}{2} [D_{\ell\ell'\alpha\beta} + D_{\ell\ell'\beta\alpha}], \quad (2.42)$$

e

$$D_{\ell\ell'\alpha\beta}^A = \frac{1}{2} [D_{\ell\ell'\alpha\beta} - D_{\ell\ell'\beta\alpha}]; \quad (2.43)$$

o comutador é dado por  $[k_\alpha, k_\beta] = k_\alpha k_\beta - k_\beta k_\alpha$  e o anti-comutador dado por  $\{k_\alpha, k_\beta\} = k_\alpha k_\beta + k_\beta k_\alpha$ . Portanto, pode-se escrever que

$$D_{\ell\ell'\alpha\beta}^S = \frac{\hbar^2}{2m_0} \delta_{\ell\ell'} \delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\ell''} \frac{<\ell|\mathbf{P}_\alpha|\ell''><\ell''|\mathbf{P}_\beta|\ell'> + <\ell|\mathbf{P}_\beta|\ell''><\ell''|\mathbf{P}_\alpha|\ell'>}{E_\ell^{(0)} - E_{\ell''}^{(0)}} \quad (2.44)$$

onde  $\alpha, \beta = x, y, z$ . Pode-se observar que multiplicando  $D_{\ell\ell'\alpha\beta}^S$  pelo factor  $\hbar^2/2$ , obtemos o inverso da massa efetiva em sua forma matricial, isto é,  $1/m_{\alpha\beta}$ . Por outro lado, para a parte antissimétrica  $D_{\ell\ell'\alpha\beta}^A$ , temos que

$$D_{\ell\ell'\alpha\beta}^A = \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{\ell''} \frac{<\ell|\mathbf{P}_\alpha|\ell''><\ell''|\mathbf{P}_\beta|\ell'> - <\ell|\mathbf{P}_\beta|\ell''><\ell''|\mathbf{P}_\alpha|\ell'>}{E_\ell^{(0)} - E_{\ell''}^{(0)}} \quad (2.45)$$

Na presença do campo magnético, precisa-se adicionar, à equação secular, o termo dado pela interação do campo magnético com o momento de dipolo magnético  $-\mu_B \sigma \cdot \mathbf{B}$ , levando

com isso à seguinte equação:

$$\sum_{\ell''} \left[ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} D_{\ell\ell'\alpha\beta}^S \{k_\alpha, k_\beta\} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} D_{\ell\ell'\alpha\beta}^A [k_\alpha, k_\beta] - \mu_B \sigma \cdot \mathbf{B} - E \delta_{\ell\ell'} \right] f_{\ell'} = 0. \quad (2.46)$$

Vamos então reescrever o comutador  $[k_x, k_y]$  em termos do momento magnético:

$$[k_x, k_y] = \frac{ieB_z}{\hbar} = iB_z \left( \frac{e\hbar}{2m_0} \right) \left( \frac{2m_0}{\hbar^2} \right) = i\mu_B B_z \frac{2m_0}{\hbar^2}. \quad (2.47)$$

Temos, portanto, que

$$\sum_{\alpha\beta} D_{\ell\ell'\alpha\beta}^A [k_\alpha, k_\beta] = \frac{ieB_z}{\hbar} \mu_B \left[ \sum_{\ell''} \frac{<\ell|\mathbf{P}_\alpha|\ell''><\ell''|\mathbf{P}_\beta|\ell'> - <\ell|\mathbf{P}_\beta|\ell''><\ell''|\mathbf{P}_\alpha|\ell'>}{E_\ell^{(0)} - E_{\ell''}^{(0)}} \right] \quad (2.48)$$

De acordo com a Eq. 2.44, podemos obter o momento magnético efetivo, corrigido pela interação do elétron com o cristal, conforme segue

$$\mu_B^* = |\mu_B| \left[ \delta_{\ell\ell'} + \frac{i}{m_0} \sum_{\ell''} \frac{<\ell|\mathbf{P}_\alpha|\ell''><\ell''|\mathbf{P}_\beta|\ell'> + <\ell|\mathbf{P}_\beta|\ell''><\ell''|\mathbf{P}_\alpha|\ell'>}{E_\ell^{(0)} - E_{\ell''}^{(0)}} \right]. \quad (2.49)$$

E a partir da expressão para o momento magnético efetivo (Eq. 2.49), podemos obter o fator  $g$  correspondente,

$$g^* = \frac{2\mu_B^*}{\mu_B} \quad (2.50)$$

Agora vamos calcular explicitamente o fator  $g$  efetivo para semicondutores com estrutura cristalina do tipo *Zinc Blend*, considerando as interações da banda de condução  $|iS\rangle$  e com as bandas de valência  $|lh\rangle$ ,  $|hh\rangle$  e *split-off*  $|sh\rangle$ . Para tanto, vamos utilizar os elementos matriciais da Tab. 2.2 para desenvolver a Eq. 2.49. Pode-se facilmente verificar que as expressões obtidas são as seguintes:

$$\left( \frac{\mu_B^*}{|\mu_B|} \right)_{hh, lh} = \frac{i}{m_0} \left[ \frac{\left( \frac{P}{\sqrt{2}} \right) \left( -i \frac{P}{\sqrt{2}} \right) - \left( i \frac{P}{\sqrt{2}} \right) \left( \frac{P}{\sqrt{2}} \right)}{E_g} + \frac{\left( -\frac{P}{\sqrt{6}} \right) \left( -i \frac{P}{\sqrt{6}} \right) - \left( i \frac{P}{\sqrt{6}} \right) \left( \frac{P}{\sqrt{6}} \right)}{E_g} \right] \quad (2.51)$$

$$\left( \frac{\mu_B^*}{|\mu_B|} \right)_{sh} = \frac{i}{m_0} \left[ \frac{\left( -\frac{P}{\sqrt{3}} \right) \left( -i \frac{P}{\sqrt{3}} \right) - \left( i \frac{P}{\sqrt{3}} \right) \left( \frac{P}{\sqrt{3}} \right)}{E_g + \Delta_0} \right] = \frac{-2P^2}{3m_0} \left[ \frac{1}{E_g + \Delta_0} \right] \quad (2.52)$$

$$\left( \frac{\mu_B^*}{|\mu_B|} \right) = \frac{-2P^2}{3m_0} \left[ \frac{1}{E_g + \Delta_0} - \frac{1}{E_g} \right] + 1, \quad (2.53)$$

Tabela 2.2 - Elementos da matriz de Kane para semicondutores volumétricos III-V.

$\ell''$	$\langle iS \uparrow   p_x   \ell'' \rangle$	$\langle \ell'' p_x   iS \uparrow \rangle$	$\langle iS \uparrow   p_y   \ell'' \rangle$	$\langle \ell''   p_x   iS \uparrow \rangle$
$hh \uparrow$	$P/\sqrt{2}$	$P/\sqrt{2}$	$iP/\sqrt{2}$	$-iP/\sqrt{2}$
$hh \downarrow$	0	0	0	0
$lh \uparrow$	0	0	0	0
$lh \downarrow$	$-P/\sqrt{6}$	$-P/\sqrt{6}$	$iP/\sqrt{6}$	$-iP/\sqrt{6}$
$sh \uparrow$	0	0	0	0
$sh \downarrow$	$-P/\sqrt{3}$	$-P/\sqrt{3}$	$iP/\sqrt{3}$	$-iP/\sqrt{3}$

O valor da constante  $P$  é obtido por meio da expressão para massa efetiva, dada pela interação entre as bandas de condução e valência, ou seja

$$\frac{m_0}{m^*} = 1 + \frac{2}{m_0} \sum_{\ell''} \frac{|\langle iS | p_x | \ell'' \rangle|^2}{E_\ell^{(0)} - E_{\ell''}^{(0)}} \quad (2.54)$$

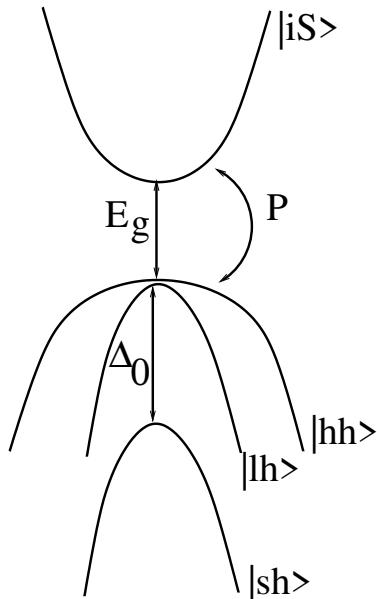


Figura 2.5 - Bandas de energia consideradas no modelo de Kane 8x8.

Analisando os elementos da Tab.2.2, obtemos da Eq. 2.54

$$\frac{m_0}{m^*} = 1 + \frac{2}{m_0} \left[ \frac{P^2}{2E_g} + \frac{P^2}{6E_g} + \frac{P^2}{3(E_g + \Delta_0)} \right] \approx \frac{2}{3m_0} \left( \frac{3E_g + 2\Delta}{E_g(E_g + \Delta)} \right) P^2. \quad (2.55)$$

Por fim, substituindo  $P^2$  na Eq. 2.50 temos

$$g* = \frac{2\mu_B^*}{\mu_B} = \left( 2 - 2\frac{m_0}{m^*} \frac{\Delta}{3E_g + 2\Delta} \right), \quad (2.56)$$

que é a expressão do fator  $g$  obtida por Roth e colaboradores (ROTH et al., 1959).

### 2.1.3 Hamiltoniano de massa efetiva e função envelope

Quando interesse recai sobre o cálculo dos níveis de energia de um sistema quântico, é necessário conhecer as energias e funções de onda, como no caso mais simples de um elétron em uma rede cristalina (sob influência num potencial periódico), pode-se obter as autofunções e autovalores aplicando o teorema de Bloch. Entretanto, no caso de heteroestruturas, onde há uma intercalação de diferentes materiais em uma direção dita então de crescimento, haverá uma quebra de simetria de translação decorrente do confinamento mesoscópico  $v(z)$  ou, eventualmente, de perturbações externas (como campos magnéticos ou campos elétricos). Em tal situação, pode-se usar o modelo de função envelope, como uma extensão da aproximação de massa efetiva. Neste modelo, assumimos as autofunções compostas de duas partes: uma parte com base em funções atômicas, dada pelas funções de Bloch, e outra que varia lentamente com relação ao parâmetro de rede, denominada função envelope. Este modelo é frequentemente usado no cálculo de sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade (SCHUURMANS; HOOFT, 1985; EPPENGA; SCHUURMANS, 1988; RAM-MOHAN et al., 1988), e permite obter autofunções e energias permitidas para portadores em heteroestructuras semicondutoras. Expressões utilizadas em cálculos de bandas de energia não parabólicas são também conhecidas na literatura (BASTARD, 1981; ROCCA; CARDONA, 1991; NAG; MUKHOPADHYAY, 1993). A teoria tem sido bem sucedida no estudo de diferentes sistemas, como poços quânticos, superredes, fios quânticos. Uma descrição detalhada pode ser encontrada no livro (WILLATZEN; VOON, 2009). Vamos aqui fazer uso desse modelo, iniciando por sua expressão amplamente conhecida:

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{ik_x x} e^{ik_y y} \sum_n f_n(z) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.57)$$

Vemos na Eq. 2.57, ondas planas restritas ao plano paralelo a interface  $x-y$ , multiplicadas pelo produto entre a função envelope e as funções de Bloch. Vamos então considerar um matriz  $\mathbf{k.p}$  de Kane muito conhecida na literatura, dada conforme a expressão (2.58). Esta expressão nos permitirá trabalhar em subespaços reduzidos e, por exemplo, projetar o hamiltiano na banda de condução, através de um processo conhecido como *folding down*. Por fim chegaremos a um hamiltoniano efetivo  $2 \times 2$  para a banda de condução, no qual já estão inclusos os termos de acoplamento Rashba e efeito de um campo magnético externo.

$$\begin{aligned}
H_{k,p} = & \begin{bmatrix}
E_c & H_{12} & H_{13} & H_{14} & 0 & i\frac{P}{2}k_y & -i\frac{\sqrt{3}}{2}Pk_y & -i\frac{P}{\sqrt{2}}k_y \\
H_{21} & E_v & 0 & 0 & i\frac{P}{2}k_y & 0 & 0 & 0 \\
H_{31} & 0 & E_v & 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2}Pk_y & 0 & 0 & 0 \\
H_{41} & 0 & 0 & E_v - \Delta & -i\frac{P}{\sqrt{2}}k_y & 0 & 0 & 0 \\
0 & -i\frac{P}{2}k_y & i\frac{\sqrt{3}}{2}Pk_y & i\frac{P}{\sqrt{2}}k_y & E_c & H_{56} & H_{57} & H_{58} \\
-i\frac{P}{2}k_y & 0 & 0 & 0 & H_{65} & E_v & 0 & 0 \\
i\frac{\sqrt{3}}{2}Pk_y & 0 & 0 & 0 & H_{75} & 0 & E_v & 0 \\
i\frac{P}{\sqrt{2}}k_y & 0 & 0 & 0 & H_{85} & 0 & 0 & E_v - \Delta
\end{bmatrix} \quad (2.58)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{12} &= P \left( ik_z - \frac{k_x}{2} \right); \quad H_{13} = -\frac{\sqrt{3}}{2} P k_x; \quad H_{14} = \frac{P}{\sqrt{2}} (ik_z + k_x); \quad H_{56} = P \left( ik_z + \frac{k_x}{2} \right) H_{57} = \\
&\frac{\sqrt{3}}{2} P k_x; \quad H_{58} = \frac{P}{\sqrt{2}} (ik_z - k_x) H_{21} = P \left( -ik_z - \frac{k_x}{2} \right); \quad H_{31} = H_{13}; \quad H_{41} = \frac{P}{\sqrt{2}} (-ik_z + k_x); \quad H_{65} = H_{21}; \quad H_{75} = -H_{13}; \quad H_{85} = -H_{14}.
\end{aligned}$$

A equação matrical pode ser escrita também na forma:

$$\sum_{n=1}^8 H_{k,p}^{8 \times 8}(k_\perp, k_z = -i\frac{\partial}{\partial z}) \Psi_n(z, k_x) = \varepsilon_n(k_\perp) \Psi_n(k_\perp), \quad n = 1, \dots, 8. \quad (2.59)$$

Considerando a simetria axial em torno de  $z$ , podemos escolher o vetor de onda paralelo ao longo do eixo  $x$  (ou, de forma equivalente,  $k_y = 0$ ), escolha esta que simplifica o problema ([MARQUES; SHAM, 1982](#); [GERCHIKOV; SUBASHIEV, 1992](#); [SILVA et al., 1994](#)); enquanto que na direção de crescimento, a componente do vetor de onda atua como operador, ou seja,  $k_z \rightarrow -id/dz$ . Consideramos ainda a descontinuidade nas bandas de condução  $E_c(z)$ , valência  $E_v(z)$ , e *split-off*  $\Delta(z)$ , e introduzimos o potencial de confinamento  $v(z)$  na

diagonal da matriz, de forma que a representação matricial obtida seja bloco diagonal:

$$\sum_{n=1}^4 H_{k,p}^{4 \times 4}(k_\perp = k_x, k_z = -i \frac{\partial}{\partial z}) \Psi_n(z, k_x) = \varepsilon_n(k_x) \Psi_n(k_x), \quad n = 1, \dots, 4, \quad (2.60)$$

ou de forma mais explícita:

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

Como mencionamos, procede-se com a projeção a partir do hamiltoniano acima, de forma que fique reduzido ao subespaço da banda de condução. Isto equivale a escrever  $f_{LH}^{\uparrow\downarrow}, f_{HH}^{\uparrow\downarrow}, f_{SO}^{\uparrow\downarrow}$  em termos de  $f_{CB}^{\uparrow\downarrow}$ , e substituir na equação matricial acima. Após efetuarmos essa projeção, pode-se verificar sem maiores dificuldades que temos o seguinte problema de autovalor e autovetor, restrito ao subespaço da banda de condução:

$$\mathcal{H}^*(z, \varepsilon) = \begin{bmatrix} H_0 - \varepsilon \uparrow & i[(\partial_z \beta) k_x + \beta[\partial z, k_x]] \\ -i[(\partial_z \beta) k_x + \beta[\partial z, k_x]] & H_0 - \varepsilon \downarrow \end{bmatrix} \begin{pmatrix} f_{CB}^{\uparrow} \\ f_{CB}^{\downarrow} \end{pmatrix} = 0, \quad (2.61)$$

onde  $H_0 = E_c + v(z) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_z(\varepsilon_\sigma, z)} \frac{\partial}{\partial z}$  e a massa efetiva  $m(\varepsilon_\sigma, z)$  e o  $\beta(\varepsilon_\sigma, z)$  são dados pelas seguintes expressões

$$\frac{1}{m(\varepsilon_\sigma, z)} = \frac{P^2}{\hbar^2} \left[ \frac{2}{\varepsilon_\sigma + E_g(z) - v(z)} + \frac{1}{\varepsilon_\sigma + E_g(z) - v(z) + \Delta(z)} \right] \quad (2.62)$$

e

$$\beta(\varepsilon_\sigma, z) = \frac{P^2}{2} \left[ \frac{1}{\varepsilon_\sigma + E_g(z) - v(z)} - \frac{1}{\varepsilon_\sigma + E_g(z) - v(z) + \Delta(z)} \right] \quad (2.63)$$

A contribuição do fator  $g$  do elétron no vácuo e a contribuição de bandas remotas (além das inclusas neste modelo) são introduzidas *ad hoc*, junto aos elementos da diagonal da

equação matricial:

$$\mathcal{H}^*(z, \varepsilon) = H_0 I + (\partial_z \beta) \begin{bmatrix} 0 & ik \\ -ik & 0 \end{bmatrix} + \beta [\partial_z, k_x] \begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \mu_0 \sigma \cdot \mathbf{B} (g_0 + \delta g_{rem}), \quad (2.64)$$

No caso de um campo magnético paralelo às camadas (ou perpendicular à direção de crescimento), isto é,  $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_y$ , decorre então o vetor potencial magnético  $\mathbf{A} = (0, zB, 0)$ , com generalização do vetor de onda dado por  $\mathbf{k}_x \rightarrow k_x + \frac{z}{\ell^2}$ , onde  $\ell^2 = \frac{\hbar}{eB}$ . Considerando o comutador  $[\partial_z, \mathbf{k}_x] = \frac{1}{\ell^2}$ , é possível reescrever a Eq. 2.64 na seguinte forma:

$$\mathcal{H}^*(z, \varepsilon) = H'_0 - \underbrace{(\partial_z \beta) k_x \sigma_y}_{H_{Rashba}} - \underbrace{\left( \frac{(\partial_z \beta) z}{\ell^2} \sigma_y - \frac{\beta}{\ell^2} \sigma_y + \frac{1}{2} \mu_0 \sigma \cdot \mathbf{B} (g_0 + \delta g_{rem}) \right)}_{H_{Zeeman}}. \quad (2.65)$$

Pode-se observar na Eq. 2.65, que o termo Zeeman apresenta uma contribuição do *bulk* e outra contribuição das interfaces

$$H_{Zeeman} = -\frac{1}{2} \sigma_y \left( \underbrace{g_0 + \frac{4m_0}{\hbar^2} \beta}_{g_{bulk}} - \frac{4m_0}{\hbar^2} (z - z_c) \frac{\partial \beta}{\partial z} + \delta g_{rem} \right) \mu_0 \cdot \mathbf{B} \quad (2.66)$$

Todos os diferentes termos são então organizados em um hamiltoniano efetivo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^*(z, \varepsilon) = & -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon)} \frac{d}{dz} + \frac{1}{2} \frac{m_0^2}{m(z, \varepsilon)} \omega_c^2 (z - z_c)^2 + E_c(z) \\ & + \frac{\mu_0}{2} \sigma_y \left\{ g_0 - \frac{4m_0}{\hbar^2} \left[ \beta(z, \varepsilon) + (z - z_c) \frac{d}{dz} \beta(z, \varepsilon) \right] + \delta g_{rem}(z) \right\} B, \end{aligned} \quad (2.67)$$

onde  $g_0 (= 2)$  que corresponde ao fator  $g$  do elétron no vácuo,  $\omega_c = eB/m_0$  é a frequência ciclotrônica,  $\beta(z, \varepsilon)$  é o coeficiente spin-órbita,  $\frac{d}{dz} \beta = \alpha_R$  é o parâmetro de acoplamento Rashba (SILVA et al., 1994; SILVA et al., 1997),  $\delta g_{rem}(z)$  é a correção de bandas remotas,  $z_c = -\ell^2 k_x$  é o centro da órbita ciclotrônica e  $\ell = \sqrt{\hbar/eB}$  é o comprimento magnético; note ainda que  $E_c(z)$  descreve o perfil da banda de condução. O Hamiltoniano efetivo 2.67 recupera resultados diversos da literatura, como os níveis de Landau e a fórmula de Roth, entre outros. É fácil verificar que o hamiltoniano  $H_{Zeeman}$  se reduz a fórmula de Roth (ROTH et al., 1959), ou seja, quando consideramos apenas o termo  $g_{bulk}$  e tomamos a energia no fundo banda banda de condução, obtemos:

$$g_{bulk}^* = \left( 2 - 2 \frac{m_0}{m^*} \frac{\Delta}{3E_g + 2\Delta} \right), \quad (2.68)$$

A fórmula de Roth Eq. 2.68 esclarece a dependência do fator giromagnético com a estrutura de bandas e as simetrias do cristal<sup>3</sup>. Esta formulação foi obtida originalmente por meio da teoria perturbação de segunda ordem. Pode-se observar que quando  $\Delta \rightarrow 0$ , o valor do fator  $g$  efetivo tende para o valor do fator  $g$  no vácuo ( $g^* = 2$ ). Em outro limite  $\Delta \gg E_g$ , vemos que o fator tende  $g^* = 2 - m_0/m^*$ ; isto significa que para materiais semicondutores com massa efetiva muito baixas, temos que  $g^* \rightarrow \frac{m_0}{m^*}$ . Por exemplo, no germânio temos  $\frac{m_0}{m^*} \sim 0.12$ ,  $\Delta \sim 0.3\text{eV}$ , e  $E_g \sim 0.8\text{eV}$ , e substituindo estes valores na fórmula de Roth, obtemos  $g^* \simeq \frac{1}{3}$ . Já no caso de InSb, o *spin-splitting* é consideravelmente maior que o *gap*, sendo que  $\frac{m_0}{m^*} \sim 0.013$ ,  $\Delta \sim 0.9\text{eV}$  e  $E_g \sim 0.2\text{eV}$ , resultando no valor de  $g^* \simeq -54$ . Kosaka (KOSAKA et al., 2001) e colaboradores elaboraram uma representação gráfica com valores experimentais do fator  $g$  efetivo semicondutores III-V e seus respectivos parâmetros de rede, como mostrado na Fig. 2.6. Este gráfico representa uma

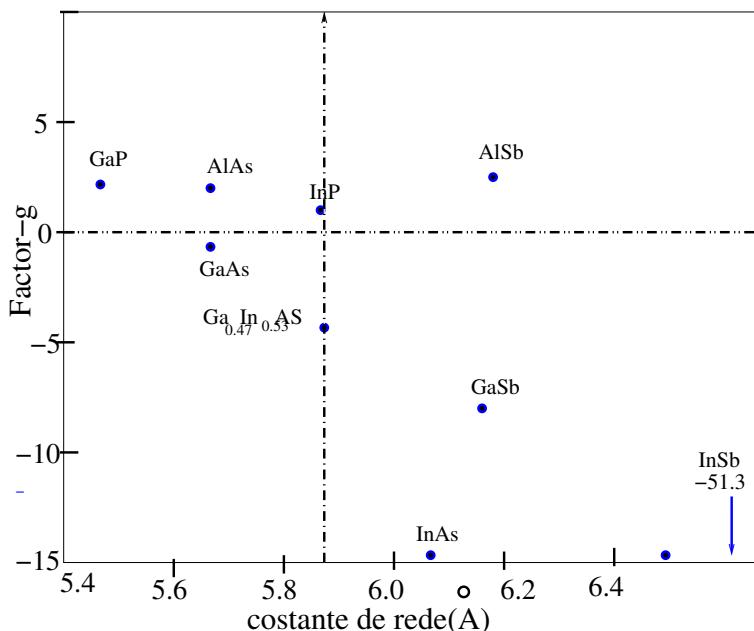


Figura 2.6 - Valores experimentais do fator  $g$  para semicondutores III-V, e seus respectivos parâmetros.

analogia com relação a uma representação gráfica muito conhecida no âmbito da engenharia de bandas. Nesta última, apresentam-se os diversos valores experimentais dos *gaps* de semicondutores e seus respectivos parâmetros de rede, visando a possibilidade junção desses semicondutores com a redução de efeitos de tensão (principalmente oriundos das diferenças entre os parâmetros de rede). A representação gráfica elaborada por Kosaka

<sup>3</sup>Conforme concebida originalmente, este modelo perde precisão no caso de semicondutores III-V com *gap* largo, como por exemplo o GaAs; neste caso as contribuições das bandas remotas (que estão além do modelo de oito bandas) tornam-se importantes.

vai além, e inclui uma certa possibilidade de manipulação, ou engenharia, do fator  $g$  por meio dessas combinações de materiais. Em heteroestruturas, contudo, abrem-se novas possibilidades de controle do fator  $g$  por meio de parâmetros estruturais, como veremos no próximo capítulo. Na próxima seção, iniciaremos as discussões sobre efeitos mesoscópico e a anisotropia do fator  $g$  (ou anisotropia giromagnética).

## 2.2 Tensor $g$ efetivo em heteroestruturas bidimensionais

O tensor giromagnético de *bulks*, na maioria dos materiais do grupo III-V é isotrópico, como é mostrado na Fig. 2.7(b). Como discutido, no caso de heteroestruturas semicondutoras há uma quebra na simetria translacional na direção de crescimento, devido ao potencial de confinamento mesoscópico, de forma que o tensor  $g_{2D}$  possui apenas duas componentes linearmente independentes, que são denotadas  $g_{\perp}^* \equiv g_{zz}$ ,  $g_{\parallel}^* \equiv g_{xx} \equiv g_{yy}$ . Portanto, o fator giromagnético em nanoestruturas semicondutoras formalmente é uma magnitude física tensorial. No caso de heteroestruturas bidimensionais, como abordado na Ref. ([IVCHENKO, 2004](#)), o tensor giromagnético pode ser escrito da seguinte forma:

$$g_{2D} = \begin{pmatrix} g_{\parallel}^* & 0 & 0 \\ 0 & g_{\parallel}^* & 0 \\ 1 & 0 & g_{\perp}^* \end{pmatrix}. \quad (2.69)$$

$g_{\perp}^*$  corresponde ao fator giromagnético perpendicular à interface e  $g_{\parallel}^*$  paralelo à interface. A diferença  $\Delta g = g_{\perp}^* - g_{\parallel}^*$  é chamada de anisotropia giromagnética. Vários trabalhos foram desenvolvidos no intuito de se compreender a relação entre os efeitos que o confinamento produz no fator  $g$ , entre trabalhos teóricos ([IVCHENKO; KISELEV, 1992](#); [IVCHENKO](#)

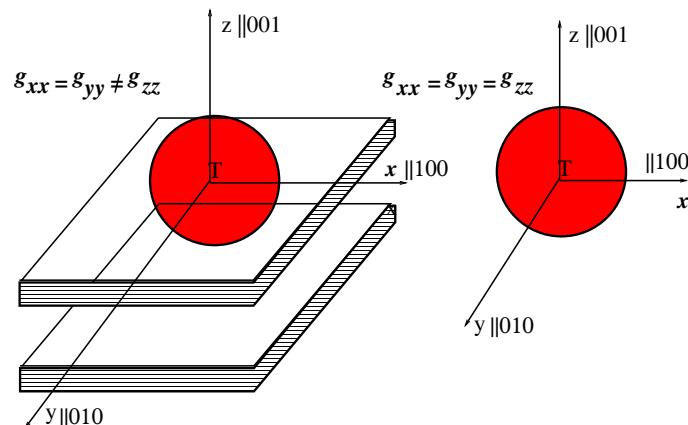


Figura 2.7 - À direita temos a representação gráfica de uma superfície de energia constante, com fatores giromagnéticos isotrópicos, ou seja,  $g_{xx} = g_{yy} = g_{zz}$ . À esquerda temos uma representação gráfica potencial mesoscópico de confinamento como um indicativo da quebra a isotropia espacial dos fatores giromagnéticos, isto é,  $g_{xx} = g_{yy} \neq g_{zz}$ .

et al., 1997; KISELEV et al., 1999; KOTLYAR et al., 2001; DIOS-LEYVA et al., 2006; PFEFFER; ZAWADZKI, 2006) e 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). Ficou então estabelecido que o fator  $g$  pode ser altamente anisotrópico, em consequência do potencial de confinamento, dos efeitos da penetração da função de onda, do tunelamento quântico e de potenciais desprovidos de um centro de inversão no espaço. Iremos nos concentrar no limite de  $B$  fraco, onde as soluções do hamiltoniano efetivo (2.67) podem ser obtidas através da teoria de perturbação de primeira ordem. Para tanto, basta calcular o valor esperado  $\langle \mathcal{H}_Z^* \rangle_{\psi_0}$ , com autoestados não perturbados  $\psi_0$  e as respectivas energias  $\varepsilon_0$ , obtidas através do problema não perturbado (para  $B = 0$ ), ou seja,  $\mathcal{H}^*(B = 0)|\psi_0\rangle = \varepsilon_0|\psi_0\rangle$ . Lembrando pode-se obter soluções particularmente interessantes na aproximação de banda plana para heteroestruturas, onde  $\beta(z)$ (Eq. 2.63) é modulada por uma função degrau, considerando assim as descontinuidades nas interfaces. Neste aproximação, parece óbvio que  $g_{\parallel} = \langle g_{bulk} \rangle_{\psi_0} + \Delta g^{2D}$ , é visto como uma soma da média ponderada do fator  $g$  do *bulk* com uma contribuição oriunda da interface, como discutido na literatura<sup>4</sup>. O fator  $g$  efetivo para estados de condução pode então ser expresso em termos de  $\psi_0(z)$  e  $\varepsilon_0$ , conforme segue:

$$g_{\parallel} = g_e - \underbrace{\langle \psi_0 | g_{bulk}(z, \varepsilon_0) | \psi_0 \rangle}_{\Delta g^{2D}} - \frac{4m_0}{\hbar^2} \langle \psi_0 | \alpha_R(z, \varepsilon_0)(z - z_0) | \psi_0 \rangle. \quad (2.70)$$

onde  $z_0 = \langle z \rangle_{\psi_0}$ ;  $\Delta g^{2D}$  é identificado como a anisotropia do fator  $g$  em estruturas 2D e é proporcional a  $\delta\beta = \beta_w - \beta_b$ . Dentro da mesma ordem de aproximação, podemos encontrar o fator  $g$  efetivo considerando o campo magnético externo aplicado alinhado com a direção de crescimento  $z$  (ou seja,  $\mathbf{B}$  é perpendicular à interface), situação para a qual o termo de Rashba não apresenta contribuição para hamiltoniano efetivo e o fator  $g$  é então renormalizado apenas pela contribuição do *bulk*, isto é,  $g_{\perp} = \langle g_{bulk} \rangle_{\psi_0}$ . A teoria desenvolvida para a configuração perpendicular é menos direta, no entanto, o resultado não poderia ser mais simples, mais razoável e em melhor concordância com os experimentos (YUGOVA et al., 2007). De maneira usual, o  $g_{bulk}$  médio pode ser escrito em termos dos principais parâmetros, tal que

$$g_{\perp} = g_0 - \sum_{i=b,w} \left( \frac{m_0}{m_i(\varepsilon_0)} \frac{2\Delta^{(i)}}{3\varepsilon_g^{(i)}(\varepsilon_0) + 2\Delta^{(i)}} - \delta g_r^{(i)} \right) P_i, \quad (2.71)$$

onde  $P_i$  é a probabilidade de encontrar o elétron nas camadas  $i$  (poço ou barreira). A expressão 2.71 representa o valor esperado do fator  $g$  do *bulk*, onde considera-se o *gap*

---

<sup>4</sup>Veja, por exemplo, a Ref.(TADJINE et al., 2017)

efetivo dependente da energia:  $\varepsilon_g^{(i)}(\varepsilon_0)$  ( $= \varepsilon_0 - E_c^{(i)} + E_g^{(i)}$ ). Observe que a Eq. 2.2 generaliza a de Roth et al. para o e faz parte de nossa solução analítica para a renormalização do fator  $g$  em estruturas 2D. Esta fórmula é particularmente útil quando a densidade eletrônica de probabilidade está concentrada nas camadas ativas, de modo que  $g_{\perp}$  é determinado apenas pelo deslocamento da energia de confinamento, como já observado experimentalmente (YUGOVA et al., 2007).



### 3 RESULTADOS

Inicialmente, vamos a mostrar as soluções não perturbadas  $\psi_0$  (com energia  $\varepsilon_0$ ) para sistemas de poços quânticos duplos simétricos (SDQWs) e assimétricos (ADQWs). Essas soluções serão usadas no cálculo das componentes do tensor  $g$  efetivo, e da anisotropia correspondente. A Fig. 3.1 ilustra um sistema DQW, composto por dois poços quânticos de largura  $L_w$  separados por uma barreira central de altura  $V_0$  e largura  $L_b$ . Definimos a energia do elétron em relação ao fundo da banda de condução, de modo que  $E_c^w = 0$  e  $E_c^b = v_0$ , enquanto que  $E_c^w = -E_g^w$  e  $E_v^b = -E_g^b + v_0$  define o perfil da banda de valência.

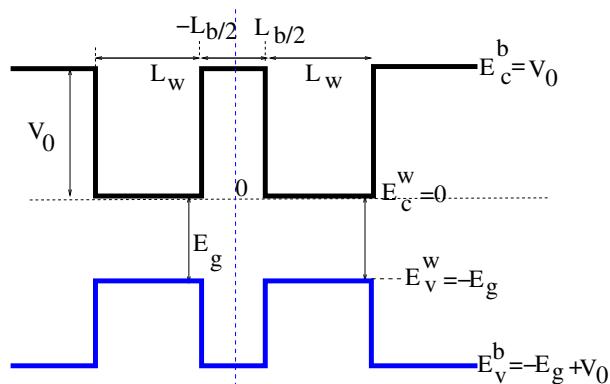


Figura 3.1 - Ilustração do perfil de potencial das bandas de valência e condução para um poço quântico duplo simétrico, com poços de largura  $L_w$  e barreira central de largura  $L_b$ . Fonte: elaboração própria.

O potencial de confinamento pode, portanto, ser expresso da seguinte forma:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } L_b/2 < |z| < L_b/2 + L_w \\ V_0 & \text{se } |z| < L_b/2 \\ V_0 & \text{se } L_b/2 + L_w < |z| < \infty. \end{cases}. \quad (3.1)$$

As soluções são bem conhecidas da física quântica e assumem superposições de ondas planas nas regiões dos poços, e ondas evanescentes nas regiões da barreiras:

$$\psi_0(z) = \begin{cases} \mathcal{D}e^{-k_b z}, & z \geq L_w + L_b/2, \\ \mathcal{A}\sin(k_w z) + \mathcal{B}\cos(k_w z), & L_b/2 \leq z \leq L_w + L_b/2, \\ \mathcal{C}(e^{k_b z} \pm e^{-k_b z}), & -L_b/2 \leq z \leq L_b/2, \\ \mp\mathcal{A}\sin(k_w z) \pm \mathcal{B}\cos(k_w z), & -L_w - L_b/2 \leq z \leq -L_b/2, \\ \pm\mathcal{D}e^{k_b z}, & z \leq -L_w - L_b/2, \end{cases} \quad (3.2)$$

onde  $\hbar k_b = \sqrt{2m_b(V_0 - \varepsilon)}$  e  $\hbar k_w = \sqrt{2m_w\varepsilon}$ , e os coeficientes  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{B}$ ,  $\mathcal{C}$  e  $\mathcal{D}$  são obtidos

da condição de normalização, ou seja,  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(z)|^2 dz = 1$ . Aplicando as condições de contorno, obtemos a seguinte equação transcendental:

$$2 \cos \Theta_w + \left( \xi - \frac{1}{\xi} \right) \sin \Theta_b - \left( \xi + \frac{1}{\xi} \right) e^{-\Theta_b} \sin \Theta_b = 0 \quad (3.3)$$

onde  $\Theta_b = k_b L_b$ ,  $\Theta_w = k_w L_w$  e  $\xi = k_b m_w / (k_w m_b)$ . A solução da 3.3 fornece as energias permitidas para o poço duplo simétrico, em função dos parâmetros estruturais  $L_w$ ,  $L_b$  e  $V_0$ , e dos parâmetros de *bulk* dos materiais da barreira e do poço, que são dados (para cada material) por  $m^*$ ,  $E_g$  e  $\Delta$ .

Consideramos agora o caso de um poço duplo assimétrico, simplesmente tomando uma das barreiras laterais como sendo infinita, conforme ilustrado na Fig. 3.2

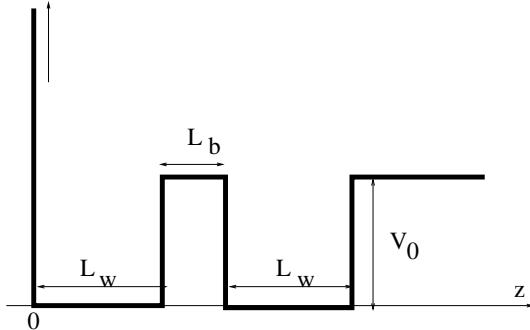


Figura 3.2 - Ilustração do perfil de potencial da banda de condução para um poço quântico duplo assimétrico (ADQW), com poços de largura  $L_w$  separados por barreira de largura  $L_b$  e altura  $V_0$ .

Neste caso, mostra-se que as funções de onda podem ser escritas da seguinte forma:

$$\psi_0(z) = \begin{cases} \mathcal{A} \sin(k_w z), & 0 \leq z \leq L_w, \\ \mathcal{B} e^{k_b z} + \mathcal{C} e^{-k_b z}, & L_w \leq z \leq L_w + L_b, \\ \mathcal{D} \cos(k_w z) + \mathcal{E} \sin(k_w z), & L_w + L_b \leq z \leq 2L_w + L_b, \\ \mathcal{F} e^{-k_b z}, & z \geq 2L_w + L_b. \end{cases} \quad (3.4)$$

Analogamente ao caso anterior, os coeficientes  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{B}$ ,  $\mathcal{C}$ ,  $\mathcal{D}$ ,  $\mathcal{E}$  e  $\mathcal{F}$  são obtidos da condição de normalização ( $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(z)|^2 dz = 1$ ); e das condições de contorno, obtemos a seguinte equação transcendental:

$$\tanh \Theta_b = \frac{\xi \sin 2\Theta_w + \cos 2\Theta_w}{\left(\frac{1}{\xi} - \xi\right) \sin \Theta_w \cos \Theta_w - \cos^2 \Theta_w - \xi^2 \sin^2 \Theta_w}, \quad (3.5)$$

cujas soluções fornecem as energias permitidas e sua dependência com o conjunto

de parâmetros que define o sistema. A Fig. 3.3 (a) mostra os resultados obtidos para a função de onda não-perturbada, considerando uma estrutura SDQW do tipo  $InP/InGaAs/InP/InGaAs/InP$ . Neste caso, fixamos  $L_w = 2\text{ nm}$  e variamos discretamente  $L_b$ , em unidades (ou passo) de  $0.2\text{ nm}$ . Interessante notar o limite de poço simples simétrico reproduzido para  $L_b = 0$  e, no outro extremo, o limite de camadas ativas não-interagentes (ou poços desacoplados) para  $L_b$  grande. Obtidas a função de onda e a energia do estado fundamental,  $\psi_0$  e  $\varepsilon_0$ , obtém-se a posição do centro da órbita ciclotrônica,  $z_0 = \langle z \rangle_{\psi_0}$ , e as probabilidades em cada região (ou camada),  $P_i = \int_i |\psi_0(z_i)|^2 dz$ . Sem muita dificuldade, mostra-se que a anisotropia (associada ao fator  $g$ ) é dada por

$$\Delta g^{SDQW} = [(\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_1)L_b + 2\mathcal{P}_2 L_w] \frac{2\delta\beta}{Ry a_0^2}, \quad (3.6)$$

onde  $\mathcal{P}_1 = |\psi_0(L_b/2)|^2$ ,  $\mathcal{P}_2 = |\psi_0(L_w + L_b/2)|^2$  são os valores da densidade de probabilidade nas interfaces, e  $Ry$  e  $a_0$  correspondem respectivamente às constantes de Rydberg e ao raio de Bohr efetivo. Importante notar a dependência de  $\Delta g$  com  $\delta\beta (= \beta_w - \beta_b)$ ,

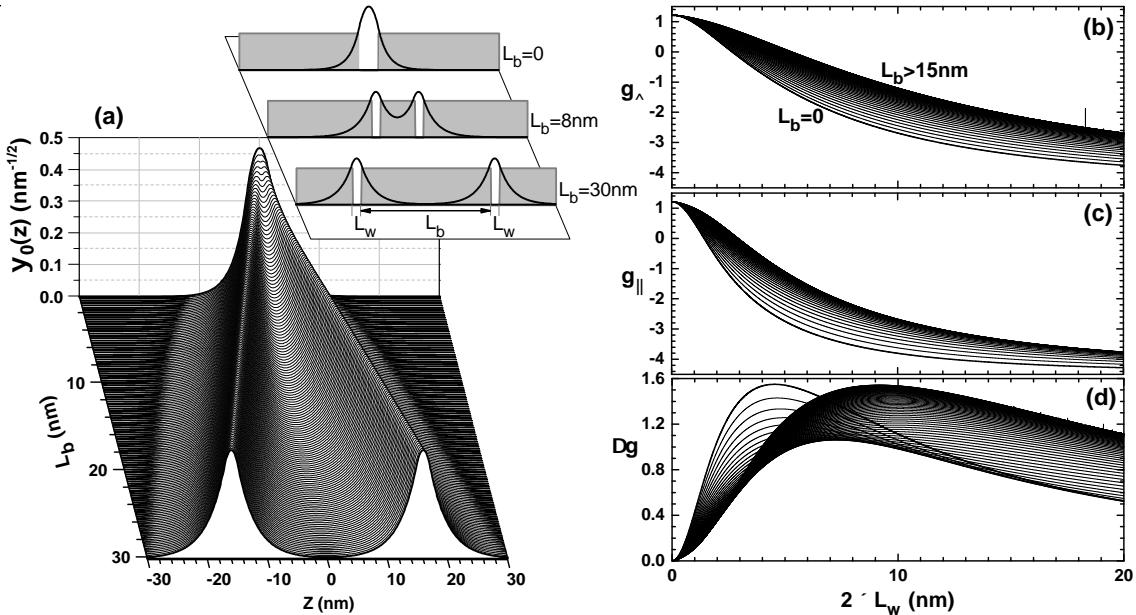


Figura 3.3 - Resultados obtidos para SDQWs. Em (a), na parte superior temos a uma representação esquemática do potencial da banda de condução e da função de onda, iniciando pelo caso limite de poço simples ( $L_b = 0$ ), passando pelo caso de poço interagentes e, por fim, não-interagentes ( $L_b$  largo); mostra-se, logo abaixo, a função de onda variando gradativamente com a largura da barreira (que varia em unidades de  $0.2\text{ nm}$ ), considerando camadas ativas (ou poços) de largura de  $2\text{ nm}$ . Em (b) e (c) temos os fatores  $g$  para campos magnéticos nas configurações perpendicular e paralela, onde utilizamos a mesma malha utilizada em (a). Em (d), temos a anisotropia correspondente, ou seja,  $\Delta g^{DQW}$ . Os seguintes parâmetros foram utilizados:  $g_{InP}^* = 1.2$ ,  $g_{InGaAs}^* = -4.5$ ,  $E_g^{InP} = 1.424\text{ eV}$ ,  $E_g^{InGaAs} = 0.813\text{ eV}$ ,  $\Delta_{so}^{InP} = 0.108\text{ eV}$ ,  $\Delta_{so}^{InGaAs} = 0.326\text{ eV}$ ,  $m_{InGaAs}^* = 0.041$ , sendo a altura da barreira de  $0.244\text{ eV}$ .

ou seja, a dependência explícita da anisotropia com a diferença entre os coeficientes de acoplamento SO dos materiais da barreira e do poço (SANDOVAL et al., 2018). Seguindo a mesma parametrização de (a), nas Figs. 3.3 (b) e (c) mostramos os fatores g obtidos para campos magnéticos nas configurações perpendicular e paralela, e em (d) mostramos a anisotropia correspondente. Nesses resultados podemos observar o efeito de tunelamento (ou acoplamento) entre os poços. No regime de camadas fortemente interagentes, a anisotropia é reduzida por uma redistribuição desigual da função de onda pelas diversas interfaces do sistema, dada em termos de  $\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_1$ , esta diferença diminui na medida em que  $L_b$  cresce, de forma que no limite de poços não-interagentes a curva da anisotropia se assemelha à curva de poço simples, contudo, deslocada horizontalmente. Adicionalmente, observe que, no regime interagente, as curvas apresentam um espaçamento que diminui na medida que o sistema se aproxima do limite não-interagente, para o qual há uma convergência das curvas (em particular, para  $L_b \geq 15 nm$ ), limite este que pode ser claramente observado na região em que as curvas se encontram muito próximasumas das outras.

Utilizando o mesmo conjunto de parâmetros que utilizamos na Fig. 3.3, na Fig. 3.4 mostramos os resultados decorrentes da introdução da assimetria de inversão espacial no sistema (PADILLA et al., 2019); fazemos isto tomando uma barreiras laterais como sendo infinita, ou seja, emulando uma barreira lateral perfeitamente isolante (ou *isolante/InGaAs/InP/InGaAs/InP*). Posicionando a barreira infinita sobre a origem do sistema de coordenadas, mostra-se facilmente que a anisotropia associada ao fator g pode ser analiticamente expressa da seguinte forma:

$$\Delta g^{ADQW} = \left[ (\mathcal{P}_3 - \mathcal{P}_2 + \mathcal{P}_1) (L_w - z_0) + (\mathcal{P}_3 - \mathcal{P}_2) L_b + \mathcal{P}_3 L_w \right] \frac{2\delta\beta}{Ry a_0^2}. \quad (3.7)$$

onde  $|\psi_0(z=0)|^2 = 0$ ,  $\mathcal{P}_1 = |\psi_0(L_w)|^2$ ,  $\mathcal{P}_2 = |\psi_0(L_w+L_b)|^2$ , e  $\mathcal{P}_3 = |\psi_0(2L_w+L_b)|^2$  são os valores da densidade de probabilidade nas diferentes interfaces. Note que, diferentemente do sistema simétrico, onde a posição do centro da órbita recai sobre o centro do poço, no sistema assimétrico  $z_0 = \langle z \rangle_{\psi_0}$  pode influenciar drasticamente o comportamento da anisotropia, em particular, no limite de confinamento crítico. Neste limite, a introdução da assimetria de inversão espacial pode ter como efeito 'empurrar' o centro da órbita para fora da região ativa do sistema (para além das camadas ativas), resultando em uma inversão do sinal da anisotropia. Este comportamento pode ser observado na Fig. 3.4(d), onde vemos a anisotropia alcançar um mínimo de  $(\Delta g =) -2,4$ . Observe que, nesse regime de camadas ativas finas fortemente interagentes, os sistemas simétrico e assimétrico se distinguem completamente, sendo que tais diferenças são explicadas em termos da dependência da anisotropia com a posição do centro da órbita ciclotrônica. Interessante notar ainda que o confinamento crítico corresponde à largura de poço limite para qual o sistema permite

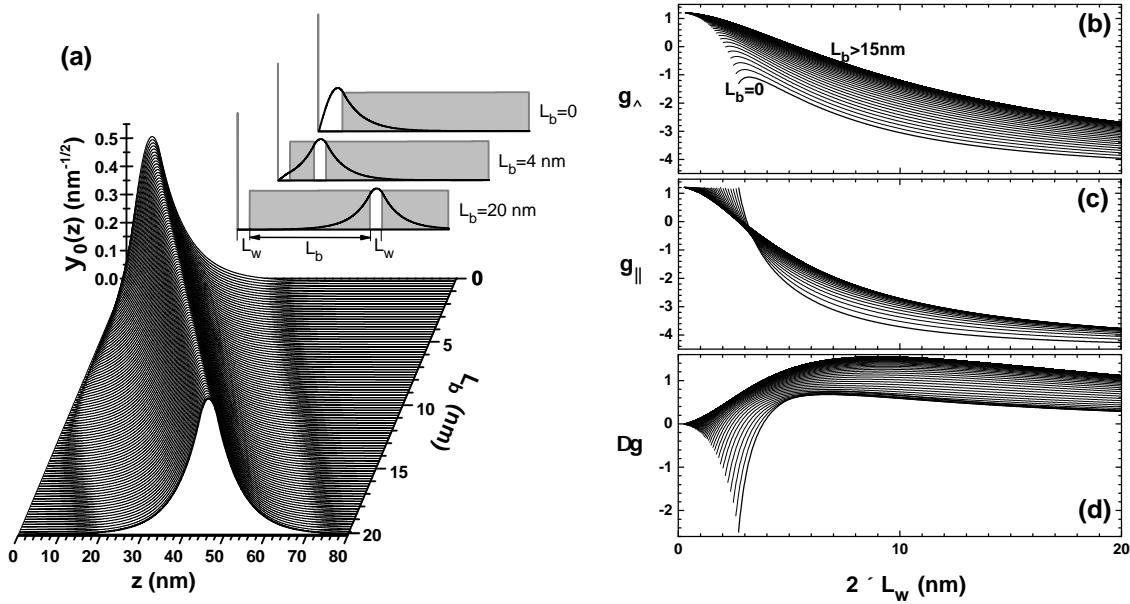


Figura 3.4 - (a) Na parte superior, mostra-se uma ilustração do potencial da banda de condução e da função de onda, iniciando pelo caso de poço simples assimétrico para  $L_b = 0$ , passando pelo caso de poços interagentes e, por fim, o caso de  $L_b$  largo, para o qual a função de onda se concentra completamente no poço simétrico; mostra-se, logo abaixo, a função de onda quando variamos gradativamente (em unidades de  $0.2 \text{ nm}$ ) a largura da barreira, considerando camadas ativas fixas com largura de  $2 \text{ nm}$ . Em (b) e (c) temos os fatores  $g$  para campos magnéticos nas configurações perpendicular e paralela, e em (d) a anisotropia correspondente. Os parâmetros utilizados foram os mesmos da Fig. 3.3.

estados ligados, cujas energias estão muito próximas ao topo da barreira de *InP*.

Uma diferença fundamental entre os sistemas simétrico e assimétrico fica evidente quando observamos os comportamentos desses sistemas com a variação da largura da barreira de tunelamento  $L_b$ . No sistema simétrico, na medida em que  $L_b$  cresce, a densidade probabilidade se distribui igualmente entre os poços até atingir o limite não interagente, em que não há mais superposição entre estados que se concentram em poços distintos; neste caso, metade da densidade de probabilidade se concentra em um poço, enquanto a outra metade se concentra no outro poço, sem que haja interação entre eles, como vemos na Fig. 3.3(a) (para  $L_b$  largo). Por outro lado, no caso do sistema assimétrico, que é composto por um poço assimétrico acoplado com um poço simétrico (veja a parte superior da Fig. 3.4(a)), na medida em que  $L_b$  cresce, a densidade de probabilidade migra para o poço simétrico, como forma de buscar uma condição que minimize a energia do sistema. No limite de  $L_b$  largo, portanto, a densidade de probabilidade se concentra completamente no poço simétrico, e nossos resultados reproduzem perfeitamente esse limite, como podemos observar nas Figs. 3.4(b), (c) e (d). Esse comportamento pode ser explicado com o auxílio da Fig. 3.5, que mostra as autoenergias do estado eletrônico fundamental, como função da

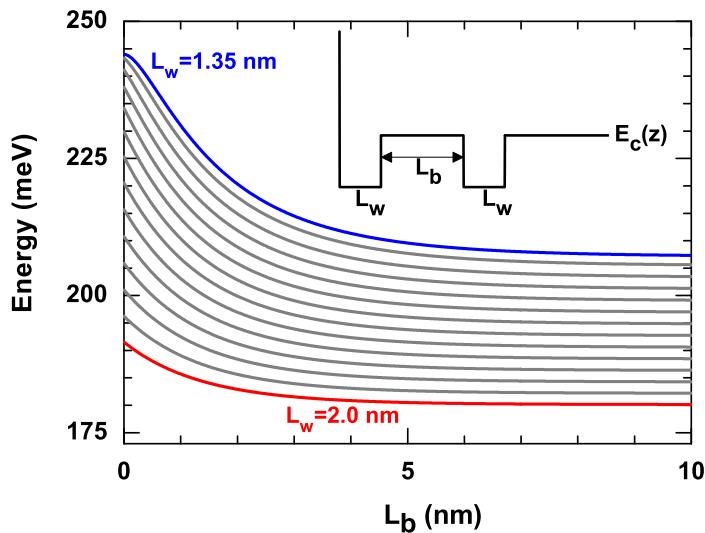


Figura 3.5 - Energia do estado eletrônico fundamental, quando confinado em uma estrutura multicamadas assimétrica do tipo *isolante/InGaAs/InP/InGaAs/InP*, descrita como um poço assimétrico (*isolante/InGaAs/InP*) acoplado com um poço simétrico (*InP/InGaAs/InP*).

largura da barreira de tunelamento  $L_b$ . Nessa figura, abordamos especialmente o regime de camadas ativas finas (ou confinamento forte). Variamos a largura das camadas ativas gradativamente, em unidades de  $0.05\text{ nm}$ , a partir do confinamento crítico, que corresponde a largura para qual o valor de energia praticamente se iguala à altura da barreira de potencial. Em particular, vemos que para  $L_b = 0$ , a energia alcança um valor muito próximo do topo da barreira de potencial (ou seja,  $0.244\text{ eV}$ ) quando  $L_w = 1.35\text{ nm}$ , sendo este portanto o valor que corresponde ao confinamento crítico. Contudo, interessante observar para esta mesma largura, a camada ativa simétrica apresentará um estado fundamental menos energético quando comparado à camada assimétrica. Dessa forma, na medida em que  $L_b$  cresce, o estado fundamental migra para a camada simétrica e vemos, por meio deste processo, uma redução energética. Para  $L_b$  grande, a densidade de probabilidade se concentrará completamente na camada simétrica e, neste limite, nossos resultados convergem para o caso de um poço simples simétrico. Observa-se, por exemplo, que  $L_b > 5\text{ nm}$  a energia varia muito lentamente e alcança a estabilidade para  $L_b > 7\text{ nm}$ , valor para o qual o sistema alcança a convergência acima mencionada.

A análise do regime de camadas finas fortemente interagentes é de particular interesse para interpretação do comportamento da anisotropia giromagnética (ou seja, anisotropia associada ao fator  $g$ ). Neste regime, a posição do centro da órbita ciclotrônica pode desempenhar um papel fundamental e levar à inversão de sinal da anisotropia. Por meio do mesmo procedimento de análise e parâmetros utilizados na Fig. 3.5, na Fig. 3.6 mos-

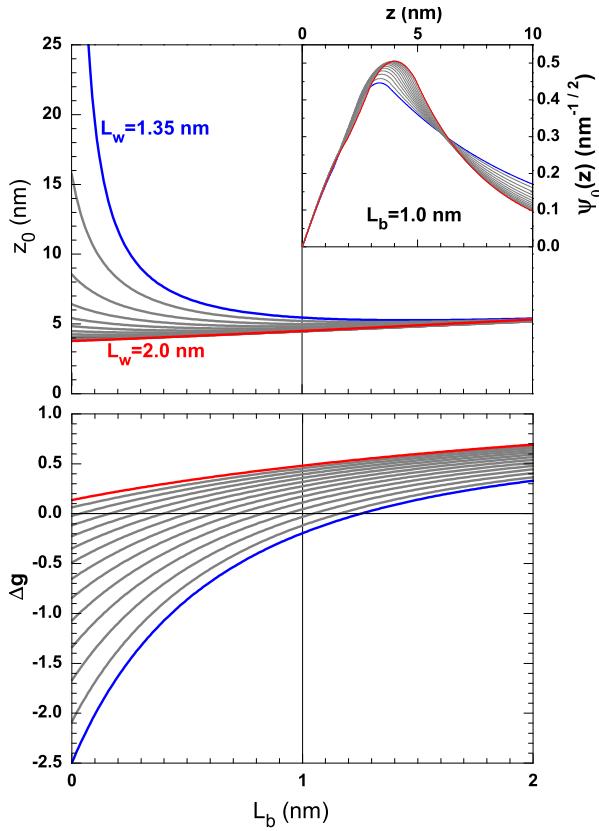


Figura 3.6 - Posição do centro da órbita do ciclotrônica, dado pelo valor esperado da posição, em função da largura da barreira de tunelamento  $L_b$ , onde variamos  $L_w$  em unidades de 0,05 nm, partindo do confinamento crítico ( $L_w = 1.35\text{ nm}$ ) até o valor de estabilização ( $L_w = 1.35\text{ nm}$ ). No painel interno, considerando esses mesmos valores de  $L_w$ , mostramos a funções de onda para  $L_b = 1.0\text{ nm}$ . No painel inferior, mostramos a anisotropia giromagnética em direta e completa correspondência às curvas de  $z_0$  mostradas no painel superior.

tramos o comportamento da posição do centro da órbita ciclotrônica. Particularmente importante notar este comportamento para valores bem próximos ao confinamento crítico; neste limite, as curvas crescem muito rapidamente no regime fortemente interagente, ou seja, para  $L_b$  pequeno. Nesta situação, os altos valores de  $z_0$ , derivados da influência do potencial confinante assimétrico, correspondem ao deslocamento do centro da órbita ciclotrônica para uma posição externa à região ativa do sistema, sendo este o mecanismo de inversão do sinal da anisotropia giromagnética - ou seja, o posicionamento do centro da órbita em relação às camadas ativas do sistema determina o sinal da anisotropia - podendo, portanto, ser controlado por meio da escolha e associação de materiais e parâmetros estruturais (como as larguras das camadas ativas e de tunelamento). Dois outros limites são claramente identificados na Fig. 3.6; vemos que as curvas de  $z_0$  convergem para retas cada vez mais próximas umas das outras, na medida que  $L_w$  cresce e alcança o valor de  $2\text{ nm}$ . Esta mudança de comportamento corresponde à realocação do centro da órbita na região ativa do sistema e a mudança de sinal da anisotropia. Por outro lado,

para  $L_b$  grande, o centro da órbita ciclotrônica migra, juntamente com a densidade de probabilidade, para o centro do poço simétrico. No painel inferior da Fig. 3.6, mostramos a anisotropia giromagnética em direta e completa correspondência às curvas de  $z_0$  mostradas no painel superior dessa mesma figura. Por completude, no painel interno mostramos as funções de onda (não perturbadas) que utilizamos no cálculo perturbativo.

Com o objetivo de comparar diretamente os dois sistemas considerando completamente o espaço de parâmetros estruturais disponível, na Fig. 3.7 mostramos os gráficos que expressam a anisotropia, para cada sistema, como funções contínuas das larguras das camadas ativas e da barreira de tunelamento. A magnitude da anisotropia é dada em escala de cores, sendo que a Fig. 3.7(a) corresponde ao sistema simétrico e a Fig. 3.7(b) ao sistema assimétrico. Com os mapas dispostos um ao lado do outro, vemos claramente que os sistemas se distinguem drasticamente no regime de camadas ativas finas fortemente interagentes, isto é, na região limitada por  $2 \times L_w < 12 \text{ nm}$  e  $L_b < 4 \text{ nm}$ . Este pode ser considerado o domínio de influência do efeito de assimetria de inversão; ou seja, para além desse domínio, ambos sistemas se comportam de forma semelhante e o efeito de assimetria perde a sua influência. As diferenças observadas entre os sistemas são entendidas em termos das discussões prévias; na Fig. 3.7(a), a análise se inicia a partir de  $L_b = 0$ , com uma única camada ativa (simétrica) de largura  $2 \times L_w$ , cuja anisotropia giromagnética alcança um máximo de 1.6 quando  $2 \times L_w$  está em torno de 5 nm. Por outro lado, na região de alta anisotropia, para  $2 \text{ nm} < 2 \times L_w < 12 \text{ nm}$ , vemos que a introdução da barreira de tunelamento causa a redução da anisotropia (conforme a explicação prévia), este efeito não apresenta, contudo, longo alcance, de forma que a anisotropia reestabelece rapidamente seu comportamento e alcança o mesmo valor máximo (de 1.6) para  $L_w > 6 \text{ nm}$ , permanecendo estável daí em diante. Nesta região, para  $2 \text{ nm} < 2 \times L_w < 12 \text{ nm}$  e  $L_w > 6 \text{ nm}$ , temos poços desacoplados cujas larguras maximizam a anisotropia. Ainda no que con-

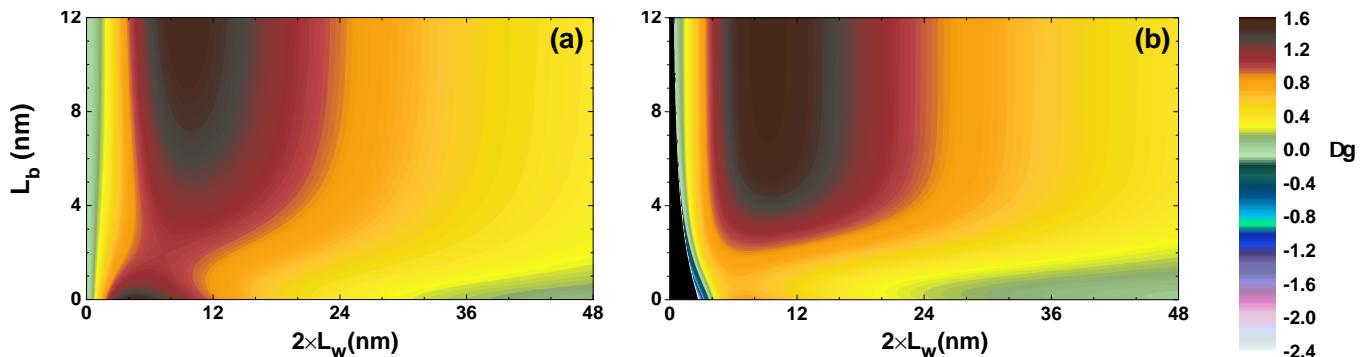


Figura 3.7 - Anisotropia giromagnética ( $\Delta g = g_{\perp} - g_{\parallel}$ ) como função contínua das larguras dos poços  $L_w$  e da barreira que os separa  $L_b$ . Note o pequeno domínio de valores negativos em (b), com um valor extremo global de  $\Delta g = -2.4$  no limite de camadas ativas finamente interagentes.

cerne à região de camadas ativas finas fortemente interagentes, note na Fig.3.7(b) que a região escura corresponde ao domínio no espaço de parâmetros para o qual o sistema (assimétrico) não apresenta estados ligados, e à margem desse domínio, os primeiros estados ligados permitidos são aqueles que correspondem ao confinamento crítico. Nessa região, vemos um estreito conjunto de valores negativos para a anisotropia, que alcança um valor extremo global de  $\Delta g = -2.4$ , e também vemos que esse comportamento muda rapidamente na medida em que aumentos as larguras das camadas (tanto as ativas, quanto as camadas de tunelamento). Conforme a discussão prévia, na medida em que nos afastamos desse regime, os sistemas simétrico e assimétrico apresentam comportamento semelhante, como pode ser observado quando comparamos as Fig.3.7(a) e (b).

### 3.1 Semicondutores de *gap* estreito

No âmbito da Física da Matéria Condensada, há atualmente um grande interesse por fases ditas topológicas da matéria, que abrangem isolantes topológicos ([HASAN; KANE, 2010](#)), semimetais ([ARMITAGE et al., 2018](#)) e supercondutores ([QI; ZHANG, 2011](#)). Sob este ponto de vista, os estados da matéria podem ser analisados em termos da fase de Berry ([BERRY, 1984](#)), que determina a evolução ou a possibilidade de transição entre estados da matéria por meio de transformações adiabáticas do sistema. Diferentes plataformas/estruturas (foram e) estão sendo propostas na busca por novos estados da matéria e seus promissores benefícios tecnológicos; por exemplo, a busca por Férmiões de Majorana está atrelada à propostas para computação quântica ([LUTCHYN et al., 2018](#)). Uma das plataformas mais exploradas na busca por férniões de Majorana consiste de um substrato supercondutor sob o qual é depositado um nanofio constituído por um semicondutor caracterizado por um alto fator  $g$  efetivo. Este requisito para o fator  $g$  é o que permite uma quebra sensível da degenerescência de spin (ou efeito Zeeman), mesmo sob a influência de um campo magnético fraco, permitindo assim a preservação do caráter supercondutor dessa plataforma. Dentre os semicondutores que satisfazem esses requisitos, as ligas *InSb* e *InAs* estão entre as mais estudadas. Essas ligas também são caracterizadas por uma baixa massa efetiva, alta mobilidade eletrônica e alto parâmetro de acoplamento spin-órbita ([KALLAHER et al., 2010](#); [KHODAPARAST et al., 2004](#); [GILBERTSON et al., 2009](#)).

Os materiais com um alto fator  $g$  efetivo são, portanto, de particular interesse na composição de plataformas que buscam hospedar fases exóticas (topológicas), através da supercondutividade induzida por proximidade. Ademais, o fator de semicondutores com alto fator  $g$  apresentarem uma excelente resposta de suas propriedades dependentes spin, quando sob influência de campos magnéticos, torna esses materiais propícios para aplicações diversas em dispositivos spintrônicos ([ZUTIC et al., 2004](#)). Contudo, embora haja um grande interesse desses materiais em campos atuais de pesquisa, como nos campos supramencio-

Tabela 3.1 - Parâmetros de ligas semicondutoras consideradas neste trabalho.

	InSb	InAs	In <sub>0.53</sub> Ga <sub>0.47</sub> As	InP	CdTe	AlSb
$E_g$	0.24	0.42	0.81	1.42	1.59	2.38
$\Delta$	0.81	0.38	0.33	0.11	0.80	0.67
$m^*$	0.014	0.023	0.041	0.079	0.093	0.13
$g^*$	-51.6	-14.9	-4.5	+1.26	-1.66	+0.84

nados, assim como em outros campos que dependem da engenharia de spin em nanomateriais, ainda não estão completamente detalhados ou mesmo bem conhecidos os diversos mecanismos de correção (ou renormalização) do fator  $g$  efetivo nesses materiais. Primeiramente, deve-se notar a dependência do fator  $g$  com o *gap* fundamental, descrita segundo a prescrição do Roth (discutida no capítulo precedente), que indica um claro aumento do fator  $g$  efetivo com a redução do *gap* fundamental, alcançando, por exemplo, um valor de  $g^* = -51.6$  para o InSb, que apresenta um *gap* considerado estreito de 0.24 eV. Essa dependência descrita pela formulação de Roth apresenta um bom acordo com dados experimentais, e é particularmente acurada para materiais de *gap* estreito. De acordo com dados experimentais disponíveis na literatura, os parâmetros mostrados na Tab. 3.1 são bem estabelecidos. Além da dependência inversa do fator  $g$  com o *gap* fundamental, as distintas contribuições devidas ao interfaceamento entre distintas ligas e efeitos mesoscópicos decorrentes não foram ainda completamente detalhados. Na Fig. 3.8 mostramos esquematicamente a diagramação das bandas (de valência e condução) de estruturas com camada ativa única, que abordamos neste trabalho.

Em particular, ilustramos estruturas obtidas a partir de interfaceamentos do tipo InP/InGaAs, AlSb/InAs e CdTe/InSb. Ainda na Fig. 3.8, importante notar as distintas barreiras de potencial, ou *band offsets*, que resultam dos alinhamentos das bandas entre as distintas interfaces. De acordo com as discussões que apresentamos na seção anterior, sabemos que esses alinhamentos desempenham um importante papel nas correções de ordem mesoscópica sobre o fator  $g$  efetivo e, particularmente, em sua anisotropia. Isto é exemplificado na Fig. 3.9, onde consideramos as estruturas de poço simples do tipo *AlSb/InAs/AlSb* e *CdTe/InSb/CdTe* ilustradas na Fig. 3.8, e mostramos os fatores  $g$  efetivos dados como funções da largura dos poços, para campos magnéticos nas configurações paralela  $\parallel$  e perpendicular  $\perp$ . Notemos primeiramente a convergência dos fatores  $g$  nos limites ditos de *bulk*, isto é, no limite de camada ativa estreita ( $L_w \rightarrow 0$ ), onde os valores convergem para os fatores  $g$  dos materiais (*bulks*) das barreiras (AlSb e CdTe), e no limite de camada ativa larga (ou  $L_w$  largo), onde os valores convergem para os fatores  $g$  dos materiais do poços (InAs e InSb). Além disso, uma vez que anisotropia aqui abordada é derivada exclusivamente das correções de ordem mesoscópica

(com origem no interfaceamento entre os materiais), os resultados mostrados na Fig.3.9 são particularmente esclarecedores; no caso de sistemas simétricos, como nos casos em questão, o sinal da anisotropia depende exclusivamente da diferença entre os parâmetros de acoplamento SO da barreira e do poço, ou seja,  $\delta\beta = \beta_w - \beta_b$ , não havendo inversão de sinal em função da variação dos parâmetros estruturais (como as larguras das camadas). Observa-se, por exemplo, que o interfaceamento *AlSb/InAs* leva a uma anisotropia negativa (derivada de um  $\delta\beta$  negativo), ao contrário do que ocorre no caso do *CdTe/InSb*, onde a anisotropia é sempre positiva. Outra diferença facilmente observada na Fig.3.9 é que, enquanto o sistema *CdTe/InSb/CdTe* apresenta um fator  $g$  altamente anisotrópico, o sistema *AlSb/InAs/AlSb* apresenta uma anisotropia de baixa magnitude, mesmo quando comparado ao poço de *In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As* abordado na seção precedente. Observe, no entanto, que o *bulk* de *InAs* apresenta um fator  $g$  efetivo aproximadamente três vezes maior do que o *bulk* de *In<sub>0.53</sub>Ga<sub>0.47</sub>As*; portanto, como mencionado, vemos aqui que anisotropia giromagnética está fundamentalmente atrelada ao interfaceamento entre os materiais e os efeitos mesoscópicos resultantes. Isto também é observado quando analisamos o alcance da anisotropia em função da largura da camada ativa, onde vemos que, em decorrência de um liguíssimo *band offset*, a anisotropia giromagnética na estrutura *AlSb/InAs/AlSb* se estende por um domínio muito menor do que aquele observado na estrutura *CdTe/InSb/CdTe*. Note que, em estruturas com *band offset* largo, a função de onda decai rapidamente na medida em que aumentamos a largura da camada ativa, e os efeitos mesoscópicos tendem então a desaparecer. Com o intuito de analisar efeitos

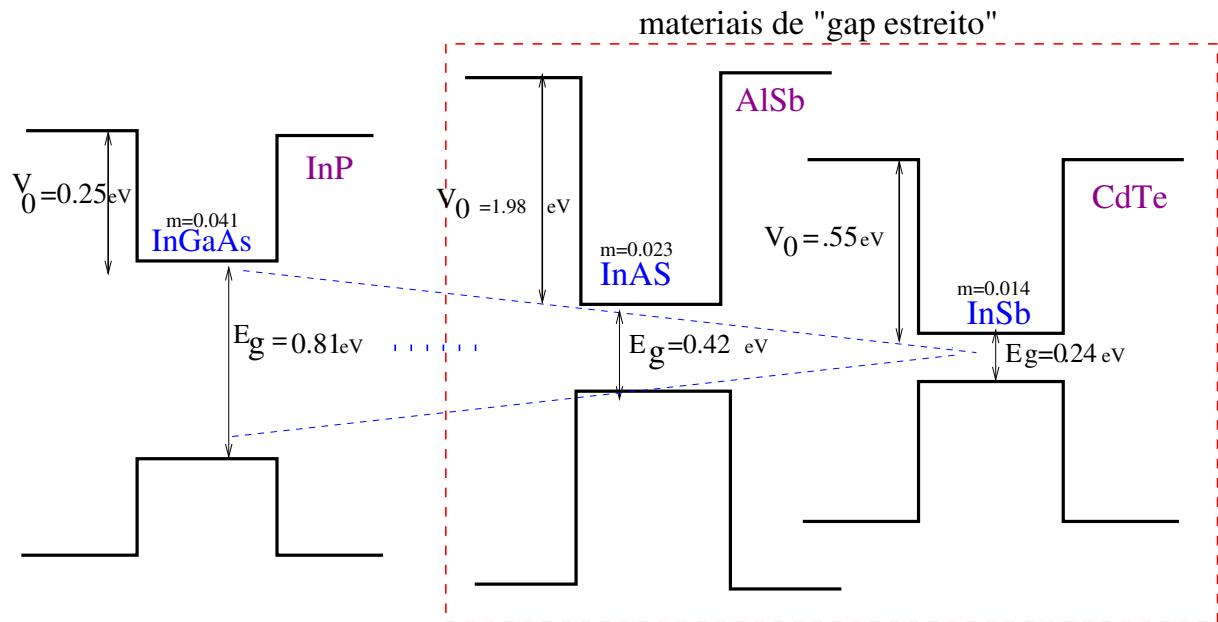


Figura 3.8 - Representação gráfica do diagrama de bandas das heteroestruturas, com particular ênfase no gap dos materiais semicondutores considerados neste trabalho.

mesoscópicos que são característicos de heteroestruturas, a seguir vamos explorar efeitos decorrentes da quebra da simetria de inversão espacial e do tunelamento quântico inter-camadas, de forma análoga ao estudo que foi desenvolvido na seção anterior.

Na Fig. 3.10 mostramos esquematicamente um sistema multicamadas, considerando *InAs* e *InSb* como possíveis camadas ativas. Observe ainda que estamos considerando sistemas simétricos com relação à operação de inversão no espaço. Este sistema deve permitir estudar exclusivamente o efeito de tunelamento quântico entre as camadas ativas. Na Fig. 3.11 mostramos os fatores  $g$  para as estruturas *AlSb/InAs/AlSb/InAs/AlSb* e *CdTe/InSb/CdTe/InSb/CdTe*, considerando campos magnéticos nas configurações perpendicular e paralela, assim como a anisotropia correspondente. Iniciamos a análise pelo limite em que  $L_b = 0$ , caso em que o sistema apresenta uma única camada ativa, para o qual nossos resultados reproduzem exatamente os resultados presentes na Fig. 3.9. Variando gradativamente a largura da central em unidades de  $0.2\text{ nm}$ , vemos novamente uma redução do módulo da anisotropia, efeito que apresenta explicação semelhante àquela discutida na seção anterior. Adicionalmente, observamos que o sistema com interfaces *AlSb/InAs* alcança rapidamente o limite não interagente, em virtude do largo *band off*.

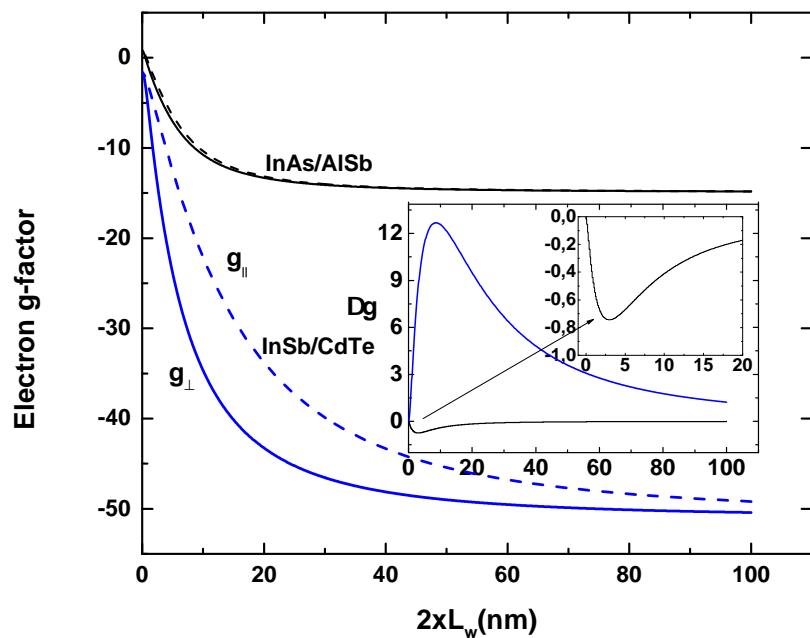


Figura 3.9 - Para estruturas de poço simples do tipo *AlSb/InAs/AlSb* e *CdTe/InSb/CdTe*, considerando campos magnéticos nas configurações paralela  $\parallel$  e perpendicular  $\perp$ , temos os correspondentes fatores  $g$  efetivos dados como funções das larguras dos poços (ou seja, das camadas ativas desses sistemas).

set. Por uma questão de completude, na Fig.3.12 mostramos os resultados como funções contínuas da largura da barreira central ( $L_b$ ), e consideramos a variação gradativa da largura das camadas ativas (em unidades de  $1\text{nm}$ ). Neste caso, o sistema também apresenta limites bem definidos, em particular, iniciamos nossa análise por um *bulk* formado pelo material da barreira, quando  $L_w = 0$ , e alcançamos o outro extremo, ou seja, o caso de um *bulk* formado pelo material do poço para  $L_w$  largo. Este último limite é alcançado mais rapidamente (ou seja, para menores valores de  $L_w$ ), no sistema com interfaces do tipo *AlSb/InAs*, uma vez que estas interfaces apresentam um *band offset* particularmente alto.

Com o intuito de compararmos as anisotropias dos dois sistemas utilizando o espaço de parâmetros estruturais expandido pela largura da barreira de tunelamento, além da largura das camadas ativas, na Fig. 3.13 mostramos os gráficos em forma de mapas, que expressam, para cada sistema, a anisotropia como funções contínuas desses parâmetros estruturais. Aqui a magnitude da anisotropia é dada em escala de cores, usada de maneira independente para cada sistema. Com os mapas dispostos um ao lado do outro, podemos comparar diretamente os dois sistemas e identificar suas principais diferenças. Entre as diferenças mais notáveis, vemos que, para o sistema com interfaces do tipo *CdTe/InSb*, a anisotropia é sempre positiva (ou nula) e alcança um máximo próximo à 12.5, enquanto que no sistema com interfaces do tipo *AlSb/InAs*, a anisotropia é sempre negativa (ou nula) e alcança um mínimo de  $-0.77$ . Além disso, vemos uma drástica diferença em relação à dependência desses resultados com o confinamento quântico, de forma que anisotropia tende a desaparecer rapidamente na medida em que o confinamento diminui, no caso do

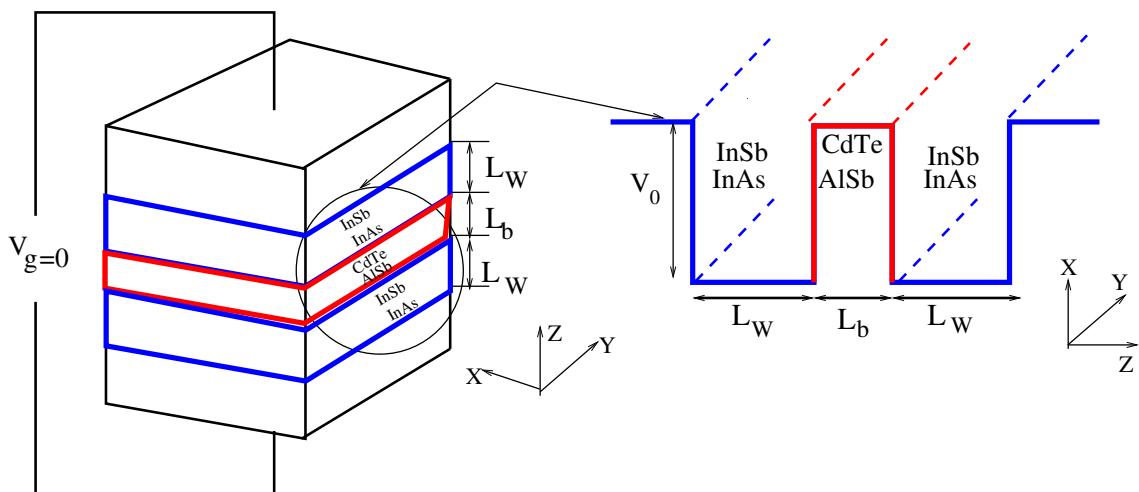


Figura 3.10 - À esquerda temos uma representação esquemática de uma estrutura multicamadas, onde consideramos possíveis camadas ativas compostas por semicondutores de *gap* estreito (*InSb* e *InAs*), e à direita temos o perfil do potencial da banda de condução, com um centro de inversão espacial sobre a barreira posicionada entre os poços.

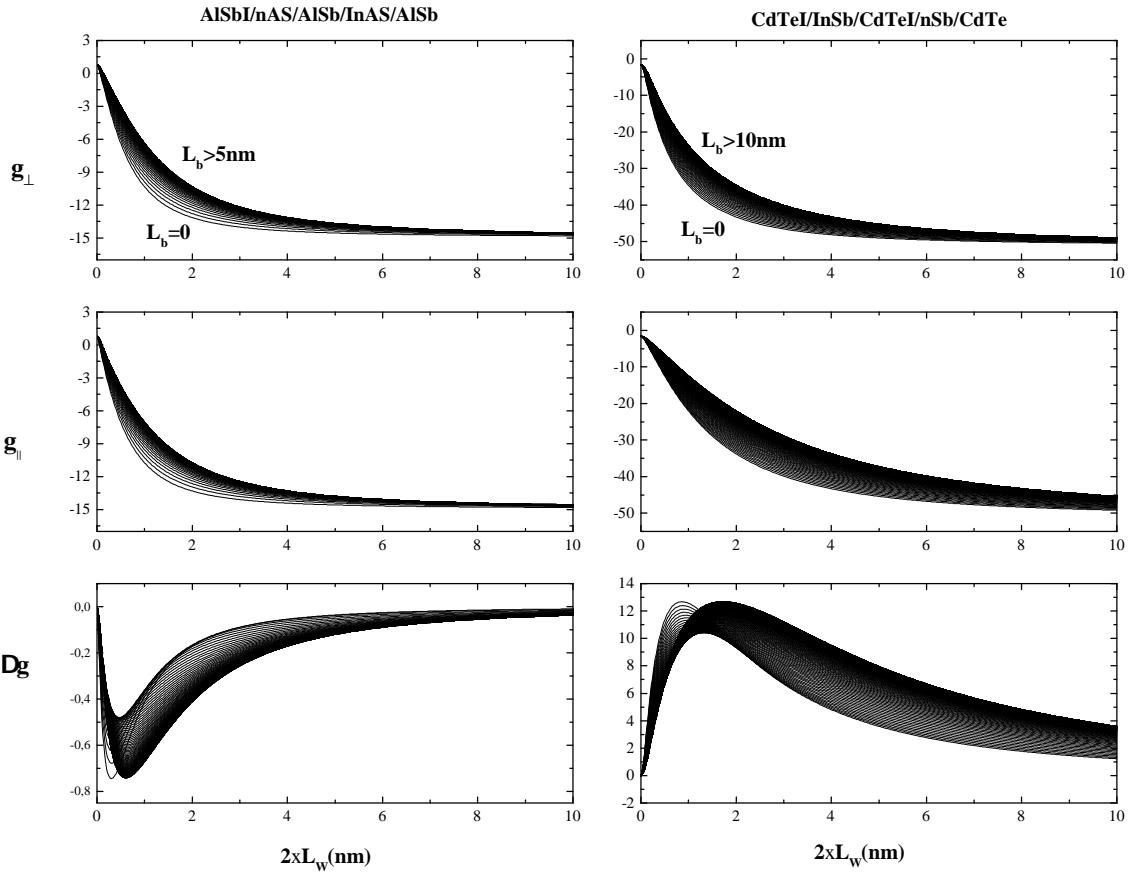


Figura 3.11 - Conforme a representação esquemática da Fig. 3.10, considerando as estruturas multicamadas  $AlSb/InAs/AlSb/InAs/AlSb$  e  $CdTe/InSb/CdTe/InSb/CdTe$ , mostramos aqui os fatores  $g$  para campos magnéticos nas configurações perpendicular e paralela, e a anisotropia correspondente, como funções contínuas das larguras das camadas ativas. A análise se inicia pelo caso de poço simples simétrico para  $L_b = 0$ , e variando gradativamente, em unidades de  $0.2\text{ nm}$ , a largura da barreira central, passamos pelo caso de poços interagentes, até alcançarmos o limite de  $L_b$  largo, em que as camadas ativas estão desacopladas. Os parâmetros utilizados são aqueles presentes na Tab. 3.1.

sistema composto por interfaces do tipo  $AlSb/InAs$ . Para este sistema, vemos, portanto, uma ampla região em que a anisotropia se aproxima de zero e alcança uma notável estabilidade. Conforme discutido previamente, esse comportamento é explicado pelo alto *band offset* apresentado por essa estrutura, que reduz o alcance dos efeitos mesoscópicos, quando estimados em termos do espaço de parâmetros disponível.

Por fim, vamos investigar o efeito da quebra da simetria de inversão espacial, a partir da introdução de uma barreira lateral infinita (vista como um material perfeitamente

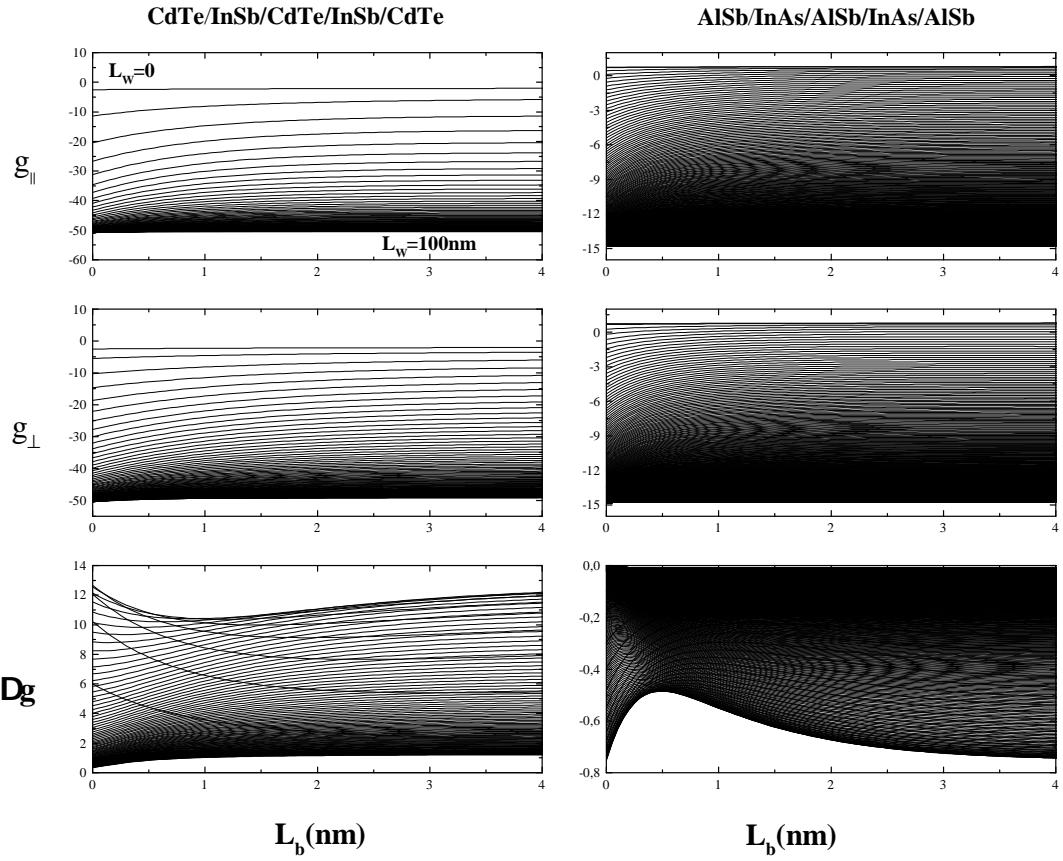


Figura 3.12 - Conforme a representação esquemática da Fig. 3.10, considerando as estruturas multicamadas  $AlSb/InAs/AlSb/InAs/AlSb$  e  $CdTe/InSb/CdTe/InSb/CdTe$ , mostramos aqui os fatores  $g$  para campos magnéticos nas configurações perpendicular e paralela, e a anisotropia correspondente, como funções contínuas da largura da barreira central ( $L_b$ ), onde variamos gradativamente a largura das camadas ativas ( $L_w$ ) em unidades de  $1\text{nm}$ . A análise se inicia por um *bulk* formado pelo material da barreira, quando  $L_w = 0$ , e alcança o caso de um *bulk* formado pelo material do poço para  $L_w$  largo. Utilizamos os parâmetros de acordo com a Tab. 3.1.

isolante). Na Fig. 3.14, mostramos de maneira esquemática um sistema multicamadas, onde introduzimos uma camada de um isolante perfeito em uma das laterais da região ativa do sistema. À direita temos o potencial da banda de condução, com quebra da simetria de inversão no espaço, promovida pela introdução do material isolante. Neste sistema, em particular, os efeitos decorrentes da assimetria e do tunelamento atuam de forma conjugada, principalmente no limite de camadas ativas finamente interagentes, conforme discutido na seção anterior. Ainda de acordo com as discussões prévias, recordemo-nos que, em geral, os efeitos mesoscópicos tornam-se mais relevantes em heteroestruturas que apresentam um menor *band offset*. Portanto, nos concentraremos aqui no sistema com interfaces do tipo  $CdTe/InSb$ , visto que o sistema caracterizado

por interfaces do tipo *AlSb/InAs* apresenta um elevadíssimo *band offset*.

Na Fig. 3.15, apresentamos os resultados obtidos para uma estrutura do tipo *Isolante/InSb/CdTe/InSb/CdTe*. No painel superior à esquerda, temos a anisotropia giromagnética e, logo abaixo, temos as energias permitidas, ambas grandezas calculadas como funções contínuas da largura da barreira de tunelamento. Os gráficos são elaborados a partir da variação gradativa da largura das camadas ativas em unidades de  $0.2\text{ nm}$ , iniciando pelo confinamento crítico. Com base nessa mesma parametrização, mostramos a posição do centro da órbita à direita, no painel superior. Este gráfico é particularmente esclarecedor, pois mostra a sensibilidade da posição do centro da órbita com relação aos parâmetros estruturais. Quando comparamos ao caso abordado na seção anterior, em que temos um sistema assimétrico multicamadas com interfaces do tipo *InP/InGaAs*, fica ainda mais clara a influência do *band offset* sobre o alcance do tunelamento e o domínio de influência da assimetria de inversão no espaço. Uma vez que a interface *CdTe/InSb* apresenta um *band offset* significativamente maior que no caso *InP/InGaAs*, vemos, por exemplo, que as curvas de  $z_0$  (para o caso *CdTe/InSb*) convergem rapidamente, e o domínio de valores (parâmetros estruturais) para os quais seria esperada a inversão de sinal da

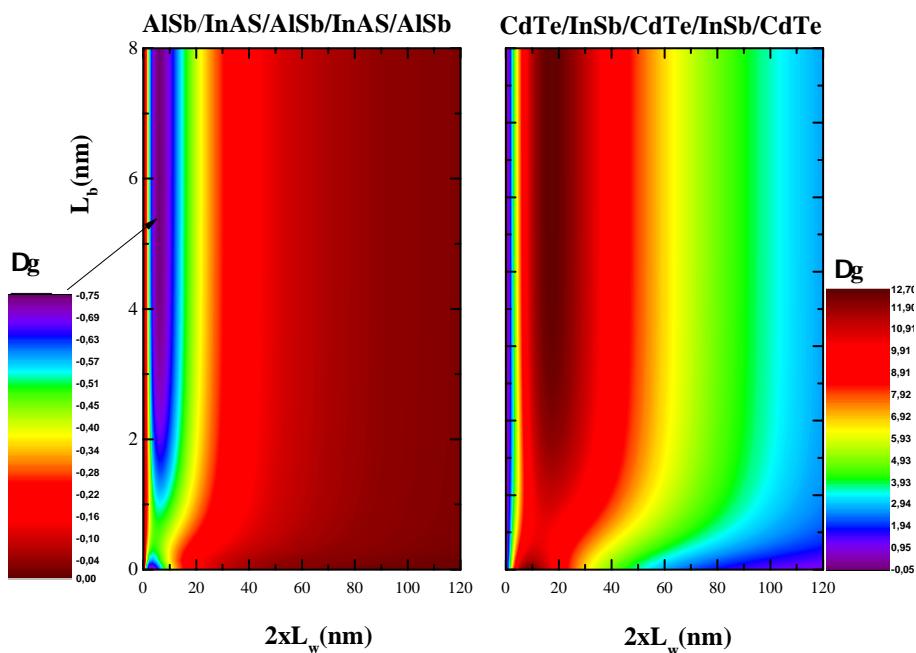


Figura 3.13 - Considerando os sistemas *AlSb/InAs/AlSb/InAs/AlSb* e *CdTe/InSb/CdTe/InSb/CdTe*, aqui mostramos magnitude da anisotropia giromagnética em escala de cores, apresentada como função cujo domínio é expandido através do espaço de parâmetros estruturais, ou seja, pelas larguras das camadas ativas ( $L_w$ ) e pela largura barreira de tunelamento ( $L_b$ ).

anisotropia não é passível de observação experimental. Vemos assim, que embora o fator  $g$  efetivo para estruturas com interfaces do tipo  $CdTe/InSb$  seja altamente anisotrópico, não se deve esperar uma mudança de direção dessa anisotropia, ou seja, a direção dita preferencial será sempre a mesma, independentemente das larguras das camadas ativas ou das barreiras de potencial. Como discutido previamente, o conhecimento desses detalhes é de interesse atual tanto do ponto de vista fundamental, quanto do ponto de vista das aplicações.

Adicionalmente, importante ainda mencionar que grupos independentes têm reportado estudos experimentais com foco na anisotropia associada ao fator  $g$  em heteroestruturas. Em particular, técnicas delicadas têm sido empregadas, como ressonância de spin de (KOWALSKI et al., 1994), medidas das oscilações de Shubnikov de Haas (HERZOG et al., 2017) e também batimentos quânticos (JEUNE et al., 1997; MALINOWSKI; HARLEY, 2000). E embora o formalismo que foi aqui aplicado tenha mostrado bom acordo com dados de experimentos independentes, como pode ser verificado na Ref. (SANDOVAL et al., 2012), do ponto de vista dos experimentos, as técnicas requerem condições peculiares e amostras de excelente qualidade, de forma que novos estudos ainda se fazem necessários para o completo desenvolvimento deste campo e compreensão dos fenômenos envolvidos, até que se alcance um maior controle sobre os diferentes mecanismos que permitem manipular o spin, ou o fator  $g$  dos portadores, por meio de uma arquitetura de materiais em escala nanométrica, e assim estabelecer um sólido alicerce para a engenharia de spin.

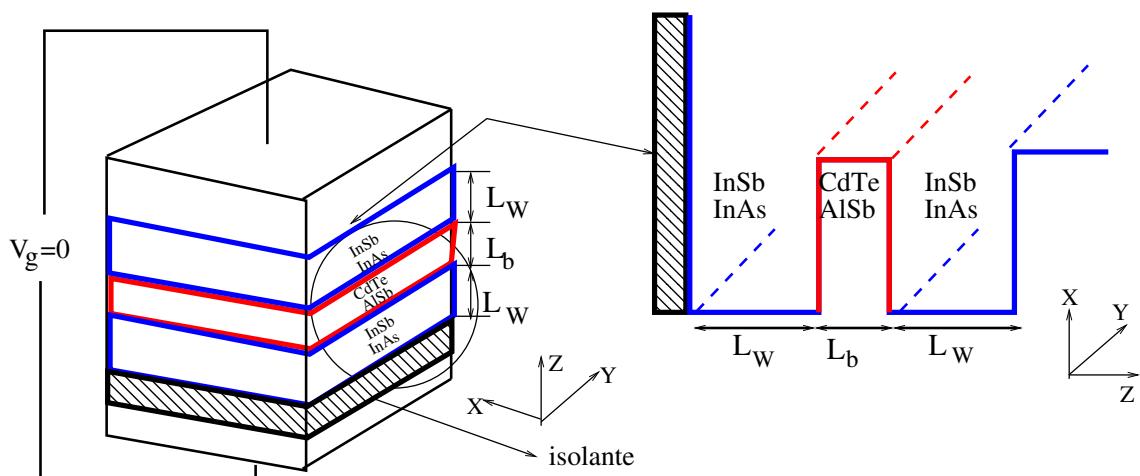


Figura 3.14 - À esquerda temos uma representação esquemática de um sistema assimétrico multicamadas, onde a quebra da simetria de inversão no espaço decorre de uma barreira lateral composta por um material isolante. À direita temos o perfil correspondente para o potencial da banda de condução.

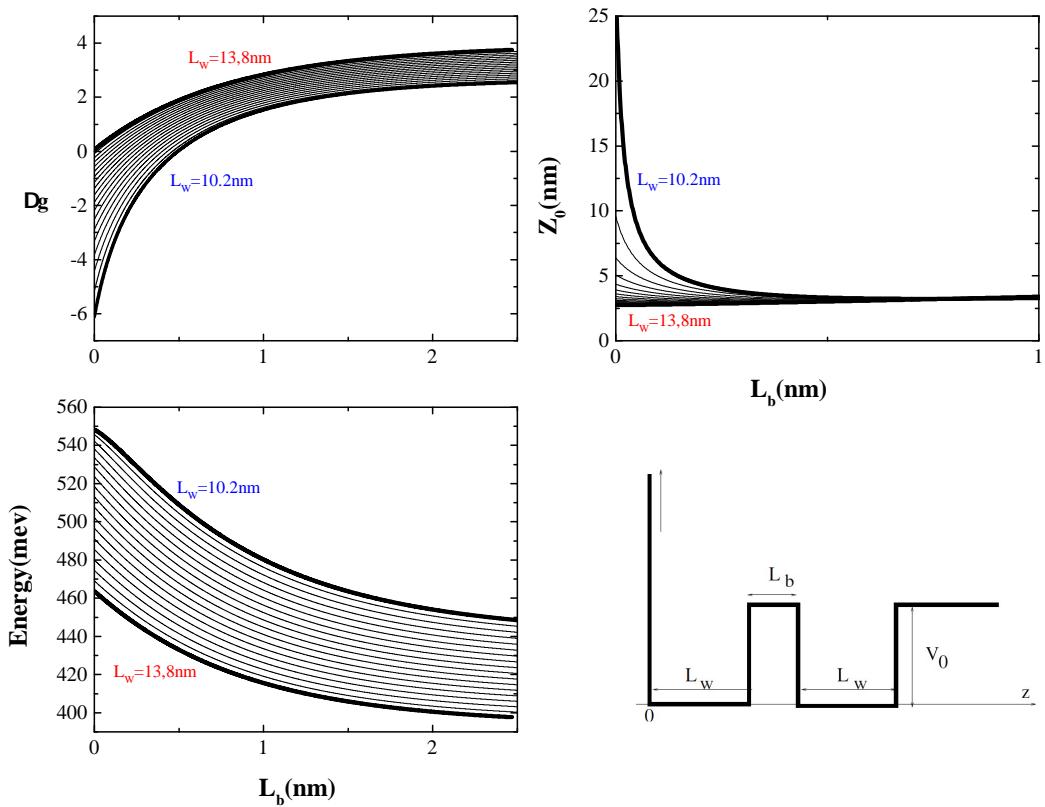


Figura 3.15 - Considerando multicamadas do tipo *Isolante/InSb/CdTe/InSb/CdTe*, à esquerda vemos a anisotropia giromagnética e as energias permitidas para elétrons, como funções da largura da barreira de tunelamento ( $L_b$ ). À direita vemos a posição do centro da órbita ciclotrônica no painel superior, também como função da largura da barreira. Variamos gradativamente a largura das camadas ativas ( $L_w$ ), em unidades de  $0.2\text{nm}$ . À direito, no painel inferior ilustramos o potencial da banda de condução e os parâmetros estruturais  $L_w$  e  $L_b$ .

## 4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Nesta tese investigamos o tensor  $g$  eletrônico efetivo em estruturas multicamadas formadas por ligas semicondutores  $III - V$ . Discutimos, inicialmente, a fundamentação teórica, que se baseia na aproximação de função de envelope e no modelo de Kane  $8 \times 8$  para o *bulk*, com objetivo de introduzir o Hamiltoniano eletrônico efetivo utilizado, que considera diferentes mecanismos de renormalização do fator  $g$  de spin, em níveis microscópico e mesoscópico. Este último, em particular, está associado a um efeito Zeeman anisotrópico, ou seja, uma separação espectral (para estados com spins opostos) cuja magnitude depende da direção que o campo magnético assume em relação ao sistema, e pode, portanto, ser expressa em termos de um tensor  $g$  efetivo. No caso de heteroestruturas semicondutoras bidimensionais, o tensor  $g$  efetivo assume (em primeira aproximação) uma forma diagonal, cujas componentes correspondem aos casos em que os campos são aplicados de forma paralela ou perpendicular à direção de crescimento. A partir desta formulação, foram consideradas estruturas multicamadas simétricas e assimétricas, para as quais obtivemos as expressões analíticas das componentes do tensor  $g$  efetivo por meio da teoria de perturbação de primeira ordem. Foram consideradas estruturas formadas pelas interfaces InP/InGaAs, AlSb/InAs e CdTe/InSb, para as quais foram analisados em comparados os efeitos de *bulk*, das interfaces, de tunelamento e de assimetria de inversão da estrutura.

Primeiramente, consideramos estruturas formadas por camadas ativas de InGaAs, com barreiras de tunelamento de InP. Neste caso, faz-se importante notar o band offset relativamente pequeno (o menor entre as estruturas consideradas nesta tese), que permite um efeito de tunelamento proeminente e resulta em uma anisotropia relativamente alta. Também aqui o efeito de penetração da função de onda na região de barreira mostra-se importante quando associado ao efeito da assimetria de inversão estrutural, que se manifesta para estruturas de camadas finas, e que pode, portanto, ser mais facilmente observado em estruturas com band offset menores. Gráficos para a anisotropia (ou seja, diferença entre os fatores  $g$  para campos paralelo e perpendicular) foram elaborados utilizando, inteiramente, o espaço de parâmetros estruturais, ou seja, as larguras das camadas ativas e da barreira de tunelamento. Esses gráficos, em forma de mapas da anisotropia, foram utilizados para comparar estruturas simétricas e assimétricas, sendo a principal diferença observada na região de camadas ativas finas fortemente interagentes, onde o efeito de assimetria de inversão estrutural leva à inversão de sinal da anisotropia em uma região próxima ao confinamento crítico (limite para o qual o sistema apresenta estados eletrônicos ligados).

A consistência dos resultados obtidos ao longo de todo o espaço de parâmetros demonstra a aplicabilidade e transparência do formalismo, que é então aplicado a estruturas com ca-

madas ativas formadas por ligas semicondutoras de gap estreito (InAs e InSb). Essas ligas apresentam um fator  $g$  efetivo de alta magnitude e são, por conseguinte, de interesse em diversas propostas de dispositivos spintrônicos. Foram estudadas estruturas (multicamadas) formadas pelas interfaces CdTe/InSb e AlSb/InAs, para as quais diferenças fundamentais foram assinaladas. Mesmo no caso de sistemas simétricos, as estruturas de CdTe/InSb e AlSb/InAs apresentam anisotropias com sinais distintos, sendo esse um resultado exclusivo decorrente da diferença entre os coeficientes de acoplamento SO das ligas que compõem a barreira de tunelamento e a camadas ativas em cada estrutura; notemos que a anisotropia do fator  $g$  depende dessa diferença, conforme demonstrado analiticamente. Contudo, o band offset extremamente alto na interface AlSb/InAs provoca uma drástica redução da anisotropia, que também é dependente da amplitude da função de onda nas interfaces. Adicionalmente, em ambos casos, o band offset relativamente alto não permite que o efeito de assimetria de inversão de estrutura se manifeste em um regime de parâmetros realísticos (ou mensurável). Em geral, resultados obtidos representam previsões claras destinadas a ajudar na compreensão, observação experimental e na manipulação do fator  $g$  efetivo, em materiais projetados com arquitetura (ou engenharia) em escala nanométrica.

Dentre as perspectivas, consideramos encontrar soluções numéricas do Hamiltoniano efetivo apresentado, sem, contudo, restringirmo-nos ao limite de campo magnético fraco. Neste caso, devemos considerar a formação de níveis de Landau, onde as grandezas dependem, em sua maioria, da magnitude do campo externo, como a magnetização a susceptibilidade magnética. O modelo pode ainda ser adaptado para o estudo do fator giromagnético em outros materiais semicondutores, como os heteroestruturas formadas por ligas *IV – VI* e também Nitretos. Estes últimos possuem propriedades físicas e elétricas que fazem desses sistemas plataformas férteis para estudar propriedades spintrônicas. Este tipo de material permite obter a anisotropia giromagnética em função dos campos de polarização e ver como os efeitos de strain e stress afetam essas propriedades.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ARMITAGE, N. P.; MELE, E. J.; VISHWANATH, A. Weyl and dirac semimetals in three-dimensional solids. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 90, p. 015001, Jan 2018. Disponível em:

<<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.90.015001>>. 61

ASHCROFT, N.; MERMIN, N. **Solid state physics**. [S.l.]: Saunders College, 1976. (Science: Physics). ISBN 9780030493461. 20, 31

BAIBICH, M. N.; BROTO, J. M.; FERT, A.; DAU, F. N. V.; PETROFF, F.; ETIENNE, P.; CREUZET, G.; FRIEDERICH, A.; CHAZELAS, J. Giant magnetoresistance of (001)fe/(001)cr magnetic superlattices. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 61, p. 2472–2475, Nov 1988. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2472>>. 17

BASTARD, G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 24, p. 5693–5697, Nov 1981. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.24.5693>>. 44

BERRY, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. **Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences**, v. 392, n. 1802, p. 45–57, 1984. Disponível em:

<<https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1984.0023>>. 61

CARTOIXÀ, X.; TING, D. Z.-Y.; CHANG, Y.-C. Suppression of the d'yakonov-perel' spin-relaxation mechanism for all spin components in [111] zincblende quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 71, p. 045313, Jan 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.045313>>. 18

CHELIKOWSKY, J. R.; COHEN, M. L. Electronic structure of silicon. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 10, p. 5095–5107, Dec 1974. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.10.5095>>. 32

DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. **Appl. Phys. Lett.**, v. 56, n. 7, p. 665–667, 1990. 17

\_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. **Applied Physics Letters**, v. 56, n. 7, 1990. 23

DAVIES, J. H. **The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1998. ISBN 9780521484916. 35

DIOS-LEYVA, M. de; REYES-GÓMEZ, E.; PERDOMO-LEIVA, C. A.; OLIVEIRA, L. E. Effects of non-parabolicity and in-plane magnetic fields on the cyclotron effective mass and  $g_{\perp}$ -factor in gaas-(ga,al)as quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 73, p. 085316, Feb 2006. Disponível em:  
<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.085316>. 49

DMYTRUK, O.; KLINOVAJA, J. Suppression of the overlap between majorana fermions by orbital magnetic effects in semiconducting-superconducting nanowires. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 97, p. 155409, Apr 2018. Disponível em:  
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.155409>. 23

DRESSELHAUS, G. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 100, p. 580–586, Oct 1955. Disponível em:  
<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.100.580>. 21

DRESSELHAUS, G.; KIP, A. F.; KITTEL, C. Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 98, p. 368–384, Apr 1955. Disponível em:  
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.98.368>. 31

DYAKONOV, M.; PEREL, V. **Dyanamicn Self-polarization of Nuclei in Solids (english)** 1972. 05 2014. 18

EPPENGA, R.; SCHUURMANS, M. F. H. Effect of bulk inversion asymmetry on [001], [110], and [111] gaas/ala quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 37, p. 10923–10926, Jun 1988. Disponível em:  
<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.37.10923>. 44

FERT, A. Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 80, p. 1517–1530, Dec 2008. Disponível em:  
<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.1517>. 17

FU, J.; PENTEADO, P. H.; CANDIDO, D. R.; FERREIRA, G. J.; PIRES, D. P.; BERNARDES, E.; EGUES, J. C. Spin-orbit coupling in wurtzite heterostructures. **Physical Review B**, American Physical Society (APS), v. 101, n. 13, Apr 2020. ISSN 2469-9969. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.101.134416>. 24

GERCHIKOV, L. G.; SUBASHIEV, A. V. Spin splitting of size-quantization subbands in asymmetric heterostructures. **Sov. Phys. Semicond.**, v. 26, n. 1, p. 73–78, 1992. 45

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/in<sub>1-x</sub>al<sub>x</sub>Sb asymmetric quantum well heterostructures. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 79, p. 235333, Jun 2009. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.235333>>. 61

HANNAK, R.; OESTREICH, M.; HEBERLE, A.; RUÄHLE, W.; KOÄHLER, K. Electron g factor in quantum wells determined by spin quantum beats. **Solid State Communications**, v. 93, n. 4, p. 313 – 317, 1995. ISSN 0038-1098. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0038109894007837>>. 49

HASAN, M. Z.; KANE, C. L. Colloquium: Topological insulators. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 82, p. 3045–3067, Nov 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.3045>>. 61

HASEGAWA, M. M.; SILVA, E. A. de Andrada e. Spin-orbit-split subbands in iv-vi asymmetric quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 68, p. 205309, Nov 2003. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.205309>>. 24

HERZOG, F.; HARDTDEGEN, H.; SCHÄPERS, T.; GRUNDLER, D.; WILDE, M. A. Experimental determination of rashba and dresselhaus parameters and g \* -factor anisotropy via shubnikov-de haas oscillations. **New J. Phys.**, v. 19, n. 10, p. 103012, 2017. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/1367-2630/19/i=10/a=103012>>. 70

III, T. P. S.; FANG, F. F. g factor of electrons in an inas quantum well. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 35, p. 7729–7731, May 1987. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.35.7729>>. 49

IVCHENKO, E.; KISELEV, A.; WILLANDER, M. Electronic g factor in biased quantum wells. **Solid State Communications**, v. 102, n. 5, p. 375 – 378, 1997. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109897000094>>. 49

IVCHENKO, E. L. **Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures**. [S.l.: s.n.], 2004. 49

IVCHENKO, E. L.; KISELEV, A. A. Electron g factor of quantum wells and superlattices. **Sov. Phys. Semicond.**, American Institute of Physics, v. 26, p. 827–831, Aug 1992. 49

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. **Semicond. Sci. Technol.**, IOP, v. 12, p. 380, 1997. 49, 70

KALLAHER, R. L.; HEREMANS, J. J.; GOEL, N.; CHUNG, S. J.; SANTOS, M. B. Spin-orbit interaction determined by antilocalization in an insb quantum well. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 81, p. 075303, Feb 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.075303>>. 61

KANE, E. **Handbook on Semiconductors**. [S.l.]: North-Holland Publishing Company, 1982. 36

KHODAPARAST, G. A.; DOEZEMA, R. E.; CHUNG, S. J.; GOLDAMMER, K. J.; SANTOS, M. B. Spectroscopy of rashba spin splitting in insb quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 70, p. 155322, Oct 2004. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.70.155322>>. 61

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. 2350239, 1999. 49

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. 28, 48

KOTLYAR, R.; REINECKE, T. L.; BAYER, M.; FORCHEL, A. Zeeman spin splittings in semiconductor nanostructures. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 63, p. 085310, Feb 2001. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.085310>>. 49

KOWALSKI, B.; OMLING, P.; MEYER, B. K.; HOFMANN, D. M.; WETZEL, C.; HÄRLE, V.; SCHOLZ, F.; SOBKOWICZ, P. Conduction-band spin splitting of type-i  $ga_xin_{1-x}as/inp$  quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 49, p. 14786–14789, May 1994. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.49.14786>>. 70

KROEMER, H. The thomas precession factor in spinâorbit interaction. **American Journal of Physics**, v. 72, n. 1, p. 51–52, 2004. 20

LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, L. M. **Quantum Mechanics Non-Relativistic Theory, Third Edition: Volume 3**. 3. ed. Butterworth-Heinemann, 1981. Paperback. ISBN 0750635398. Disponível em: <<http://www.worldcat.org/isbn/0750635398>>. 27

LITVINOV, V. **Wide Bandgap Semiconductor Spintronics**. [S.l.: s.n.], 2016. ISBN 9789814669702-CATN11646. 24

LUSAKOWSKI, A.; WRÓBEL, J.; DIETL, T. Effect of bulk inversion asymmetry on the datta-das transistor. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 68, p. 081201, Aug 2003. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.081201>>. 17

LUTCHYN, R. M.; BAKKERS, E. P. A. M.; KOUWENHOVEN, L. P.; KROGSTRUP, P.; MARCUS, C. M.; OREG, Y. Majorana zero modes in superconductor $\frac{1}{2}$ semiconductor heterostructures. **Nat. Rev. Mater.**, v. 3, p. 52–68, 2018. 28, 61

LUTCHYN, R. M.; SAU, J. D.; SARMA, S. D. Majorana fermions and a topological phase transition in semiconductor-superconductor heterostructures. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 105, p. 077001, Aug 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.077001>>. 23

MALINOWSKI, A.; HARLEY, R. T. Anisotropy of the electron  $g$  factor in lattice-matched and strained-layer iii-v quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 62, p. 2051–2056, Jul 2000. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.62.2051>>. 49, 70

MANCHON, A.; KOO, H. C.; NITTA, J.; FROLOV, S. M.; DUINE, R. A. New perspectives for rashba spin-orbit coupling. **Nature Materials**, Springer Science and Business Media LLC, v. 14, n. 9, p. 871–882, Aug 2015. ISSN 1476-4660. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nmat4360>>. 23

MARQUES, G. E.; SHAM, L. J. Theory of space-charge layers in narrow-gap semiconductors. **Surf. Sci.**, v. 113, p. 131–136, 1982. 45

NAG, B. R.; MUKHOPADHYAY, S. In-plane effective mass in narrow quantum wells of nonparabolic semiconductors. **Applied Physics Letters**, v. 62, n. 19, p. 2416–2418, 1993. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.109633>>. 44

PADILLA, J. E. L.; SANDOVAL, M. A. T.; SILVA, A. Ferreira da; SILVA, E. A. de Andrada e; ROCCA, G. C. L. g-factor anisotropy inversion in ingaas 2d nanostructures. **physica status solidi (b)**, v. 256, n. 6, p. 1800643, 2019. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/pssb.201800643>>. 56

PFEFFER, P.; ZAWADZKI, W. Anisotropy of spin  $g$  factor in GaAs $?_{x}Ga_{1-x}As$  symmetric quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 74, p. 233303, Dec 2006. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.233303>>. 49

PIKUS, G. E. Effect of deformation on the hole energy spectrum of germanium and silicon. **Soviet Physics-Solid state**, v. 1, p. 1502, 1960. Disponível em:  
<https://ci.nii.ac.jp/naid/10027632763/en/>. 31

QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. Topological insulators and superconductors. **Rev. Mod. Phys.**, v. 83, p. 1057–1110, 2011. 61

RAM-MOHAN, L. R.; YOO, K. H.; AGGARWAL, R. L. Transfer-matrix algorithm for the calculation of the band structure of semiconductor superlattices. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 38, p. 6151–6159, Sep 1988. Disponível em:  
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.38.6151>. 44

ROCCA, G. C. L.; CARDONA, M. Light-hole non-parabolicity in the single band approximation. **physica status solidi (b)**, v. 167, n. 1, p. 115–132, 1991. Disponível em:  
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/pssb.2221670114>. 44

ROTH, L. M.; LAX, B.; ZWERDLING, S. Theory of optical magneto-absorption effects in semiconductors. **Physical Review**, APS, v. 114, p. 90, 1959. 40, 43, 47

SALIS, G.; KATO, Y.; ENSSLIN, K. e. a. Electrical control of spin coherence in semiconductor nanostructures. **Nature**, v. 414, n. 7240, p. 619–622, 2001. 28

SANDOVAL, M. A. T.; PADILLA, J. E. L.; SILVA, A. Ferreira da; SILVA, E. A. de Andrada e; ROCCA, G. C. L. Mesoscopic g-factor renormalization for electrons in iii-v interacting nanolayers. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 98, p. 075312, Aug 2018. Disponível em:  
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.075312>. 56

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. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 79, p. 241305, Jun 2009. Disponível em:  
<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.241305>. 24

\_\_\_\_\_. Variational analysis of the rashba splitting in iii–v semiconductor inversion layers. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 83, p. 235315, Jun 2011. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.235315>. 24

\_\_\_\_\_. Mesoscopic spin-orbit effect in the semiconductor nanostructure electron  $g$  factor. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 86, p. 195302, Nov 2012. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.195302>. 29, 70

SANDOVAL, M. A. T.; SILVA, E. A. de Andrada e; SILVA, A. F. da; ROCCA, G. C. L. Electrongfactor anisotropy in asymmetric iii-v semiconductor quantum wells.

**Semiconductor Science and Technology**, IOP Publishing, v. 31, n. 11, p. 115008, sep 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0268-1242/31/11/115008>>. 29

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

**Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 90, p. 146801, Apr 2003. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.146801>>. 17

SCHUURMANS, M. F. H.; HOOFT, G. W. 't. Simple calculations of confinement states in a quantum well. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 31, p. 8041–8048, Jun 1985. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.31.8041>>. 44

SILVA, E. A. de Andrada e; ROCCA, G. C. L.; BASSANI, F. Spin-split subbands and magneto-oscillations in iii-v asymmetric heterostructures. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 50, p. 8523–8533, Sep 1994. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.8523>>. 24, 45, 47

\_\_\_\_\_. Spin-orbit splitting of electronic states in semiconductor asymmetric quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 55, p. 16293–16299, Jun 1997. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.55.16293>>. 24, 47

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. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 56, p. 2114–2119, Jul 1997. Disponível em:

<<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.56.2114>>. 49

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. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 44, p. 11345–11352, Nov 1991. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.44.11345>>. 49

TADJINE, A.; NIQUET, Y.-M.; DELERUE, C. Universal behavior of electron  $g$ -factors in semiconductor nanostructures. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 95, p. 235437, Jun 2017. Disponível em:

<<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.235437>>. 50

TING, D.-Y.; CARTOIXA, X. Resonant interband tunneling spin filter. **Appl. Phys. Lett.**, v. 81, p. 4198–4200, 2002. 17

TOMIMOTO, S.; NOZAWA, S.; TERAI, Y.; KURODA, S.; TAKITA, K.; MASUMOTO, Y. Anisotropic spin dynamics of confined electrons in cdte/znte quantum structures. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 81, p. 125313, Mar 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.125313>>. 49

WILLATZEN, M.; VOON, L. L. Y. **The k p Method: Electronic Properties of Semiconductors**. [S.l.: s.n.], 2009. 44

WINKLER, R. **Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems**. [S.l.]: Springer, 2003. (Physics and Astronomy Online Library, N° 191). ISBN 9783540011873. 18, 24

\_\_\_\_\_. Spin orientation and spin precession in inversion-asymmetric quasi-two-dimensional electron systems. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 69, p. 045317, Jan 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.045317>>. 18

YU, P.; CARDONA, M. **Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties**. [S.l.]: Springer, 1996. ISBN 9783540583073. 33

YUGOVA, I. A.; GREILICH, A.; YAKOVLEV, D. R.; KISELEV, A. A.; BAYER, M.; PETROV, V. V.; DOLGIKH, Y. K.; REUTER, D.; WIECK, A. D. Universal behavior of the electron  $g$  factor in  $\text{GaAs}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 75, p. 245302, Jun 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.245302>>. 50, 51

ZHANG, X. C.; ORTNER, K.; PFEUFFER-JESCHKE, A.; BECKER, C. R.; LANDWEHR, G. Effective  $g$  factor of  $n$ -type  $\text{hgTe}/\text{hg}_{1-x}\text{cd}_x\text{Te}$  single quantum wells. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 69, p. 115340, Mar 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.115340>>. 49

ZHAO, Q. X.; OESTREICH, M.; MAGNEA, N. Electron and hole g-factors in cdte/cdmgte quantum wells. **Applied Physics Letters**, AIP, v. 69, n. 24, p. 3704–3706, 1996. Disponível em: <<http://link.aip.org/link/?APL/69/3704/1>>. 49

ZUTIC, I.; FABIAN, J.; SARMA, S. D. Spintronics: Fundamentals and applications. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 76, p. 323–410, Apr 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.76.323>>. 18, 61

## **A - ANEXO: PUBLICAÇÕES E MANUSCRITOS**

- 1.** *Engineering the electron g-factor anisotropy in double quantum wells*, J. E. Leon Padilla, M. A. Toloza Sandoval; A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva; G. C. La Rocca, Proceedings of 18th Brazilian Workshop on Semiconductor Physics (BWSP 2017).
- 2.** *Mesoscopic g-factor renormalization for electrons in III-V interacting nanolayers*, M. A. Toloza Sandoval; J. E. Leon Padilla, A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva; G. C. La Rocca, PHYSICAL REVIEW B 98, 075312 (2018).
- 3.** *g-Factor Anisotropy Inversion in InGaAs 2D Nanostructures*, J. E. Leon Padilla, M. A. Toloza Sandoval; A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva; G. C. La Rocca, Phys. Status Solidi B 2019, 256, 1800643.
- 4.** *Electronic g-tensor nanoengineering of layered semiconductor systems*, J. E. Leon Padilla, M. A. Toloza Sandoval; A. Ferreira da Silva; E. A. de Andrada e Silva. Manuscrito em preparação.

# Engineering the electron g-factor anisotropy in double quantum wells

J.E. Leon Padilla<sup>1</sup>, M. A. Toloza Sandoval<sup>2\*</sup>, E. A. de Andrade e Silva<sup>3</sup>, A. Ferreira da Silva<sup>1</sup>, G. C. La Rocca<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, Salvador, Brazil.

<sup>2</sup> Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, Brazil.

<sup>3</sup> Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, Brazil.

<sup>4</sup> Scuola Normale Superiore di Pisa, Italy.

\*tolozasandoval@gmail.com

Keywords: effective g factor, quantum tunneling, spin-orbit interaction.

## Abstract

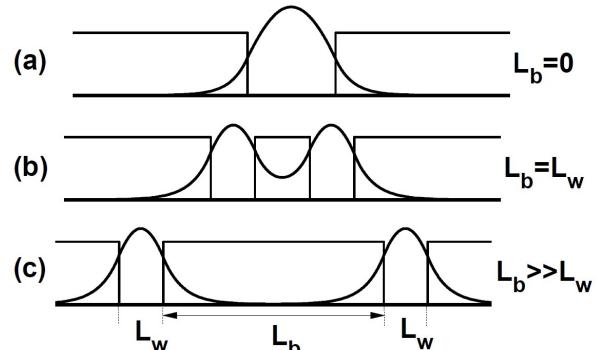
We investigate the quantum tunneling effects on the electron g factor and its main anisotropy in semiconductor double quantum wells (DQWs). With respect to single QWs, these structures introduce a new degree of freedom, given by the tunnel coupling parameter, and can be very helpful in the g-factor engineering. The eight-band effective-mass Hamiltonian for electrons in III-V double QWs and in the presence of an external magnetic field (applied both in the QW plane and along the growth direction) is solved for the g factor within first-order perturbation theory. We then calculate the g-factor anisotropy as a function of the QW width and the inter-well barrier length in typical AlGaAs/GaAs DQWs. The obtained results reproduce exactly the well-known single QW results in the corresponding limits, i.e.  $L_b=0$  and very large, and explicitly show how the well-width dependence of the g-factor anisotropy changes with  $L_b$ , interpolating between these two limiting single QWs, with well width  $2L_w$  and  $L_w$  respectively.

## Introduction

The effective g factor for electrons confined in semiconductor nanostructures can be strongly renormalized by the spin-orbit interaction and manipulated through the engineering of the confining potential [1-5]. There is today a clear and increasing technological interest in these effects in view of the development of both, new spintronic devices and quantum computation schemes, involving in particular the Majorana bound states in coupled nanowires. However, the determination and control of the electron g factor in general nanostructures is far from simple and mostly an open problem yet. For single GaAs quantum wells (QWs), it is by now clear, both theoretical [1-3] and experimentally [4,5], that the electron effective g factor interpolates from the bulk value in the AlGaAs barrier to the GaAs bulk value, as the well width goes from zero to infinity. More interestingly is that due to the break of translation symmetry along the growth direction, the effective g factor for electrons in QWs develops an anisotropy  $\Delta g^{QW}$ , corresponding to the difference between the g factor for magnetic fields applied in the QW plane and that for fields aligned along the growth direction. Such anisotropy has been clearly observed experimentally [4,5] but the agreement with the available theories [1-3] is still not complete;

there are, in particular, discrepancies between the theories regarding the anisotropy dependence with the well width [1,2]. In order to shine some light to this problem and also to understand the possible implications of the tunnel coupling in the more general double well structures (DQWs) illustrated in Figure 1, we calculate the effective g factor for electrons in these DQWs and investigate its anisotropy as a function of the well width  $L_w$  and the inter-well barrier width  $L_b$ , i.e.  $\Delta g^{DQW}(L_w; L_b)$ .

AlGaAs / GaAs / AlGaAs

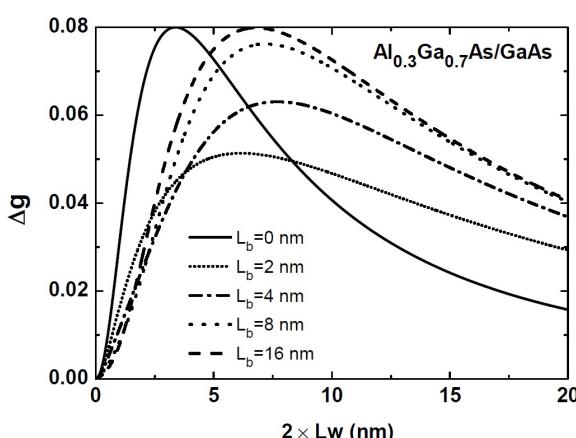


**Figure 1.** Scheme of GaAs DQW structures, with the conduction band profile, the actual ground state wave functions for confined electrons and well width  $L_w$  and inter-well barrier width  $L_b$ .

## Methods and Results

We consider DQWs consisted of two GaAs/AlGaAs QWs with the same well width  $L_w$  coupled by an inter-well AlGaAs barrier of width  $L_b$ , which represents the tunnel coupling parameter. In both extremes,  $L_b=0$  and very large, the DQW structure is reduced to single QWs. Here with these DQW calculations we can further test the above mentioned single QW results and also investigate how the anisotropy of DQW g-factor interpolates between these two single QW limits. We follow the same method of calculation used in References 2 and 3, which from the eight-band Kane model for the bulk, derives an effective-mass Hamiltonian for the conduction-band envelope function, considering both the band-offsets and the applied magnetic-field, and then solves it for the g factor, within first-order perturbation theory [2,3].

Here, instead of solving for the single QW band profile [1-3], we solve it for the DQW band profile. The details of the method, with the discussion of the approximations made, can be found in Ref. [3]; and the DQW unperturbed solution used is as given in Ref. [6]. The g factor is calculated for fields applied in the QW plane and perpendicular to it (i.e. along the growth direction) and the difference gives the g-factor anisotropy; in Fig. 2, for example, we show the results for g-factor anisotropy in AlGaAs/GaAs DQWs as a function of the well width  $L_w$ , and for different values of the coupling parameter (or inter-well barrier width).



**Figure 2.** Obtained results for the effective g-factor anisotropy for electrons confined in AlGaAs/GaAs double quantum wells as a function of the well width ( $L_w$ ) and for varying coupling strength, i.e.  $L_b$ .

## Discussion

Firstly, it is interesting to note that  $\Delta g$  is positive, which means that the in-plane g factor is larger than that along the growth direction. As expected, in the two single QW limits mentioned above, i.e. for  $L_b = 0$  and very large, the present DQW results reduce exactly to the known QW results, with the g-factor anisotropy going to zero both for very small and very large  $L_w$ . Figure 2 also shows how the function  $\Delta g(L_w)$  is modified due to the tunnel coupling between the two wells. One can see that, starting from zero, as soon as the inter-well barrier width is not negligible there is a large decrease in the maximum anisotropy and in the anisotropy variation with  $L_w$ . If one continues to increase  $L_b$ , the  $\Delta g^{DQW}(L_w)$  curve then slowly returns to the known single QW case, i.e.  $\Delta g^{DQW}(L_w; L_b \gg L_w) = \Delta g^{QW}(L_w)$ , while  $\Delta g^{DQW}(L_w; 0) = \Delta g^{QW}(2L_w)$ . Note that the absolute value of the g-factor anisotropy is however still limited by the single QW maximum anisotropy.

Summarizing, we have investigated the effective g factor for electrons in semiconductor DQWs and presented specific results for the g-factor anisotropy in AlGaAs/GaAs DQWs. New and different variations for the g-factor anisotropy as a function of both barrier and well width are obtained which describe effects of the quantum tunneling in the electron g-factor engineering, which in turn is fundamental to the development of spintronic applications.

## Acknowledgments

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

## References

- [1] Ivchenko, E. L. and Kiselev, A. A. *Sov. Phys. Semicond.* **1992**, *26*, 827.
- [2] Tolosa Sandoval, M.A.; Silva, A. F.; Andrada e Silva, E. and La Rocca, G. C. *Phys. Rev. B* **2012**, *86*, 195302.
- [3] Tolosa Sandoval, M.A.; Silva, A. F.; Andrada e Silva, E. and La Rocca, G. C. *Semicond. Sci. Technol.* **2016**, *31*, 115008.
- [4] Le Jeune, P.; Robart, D.; Marie, X.; Amand, T.; Brosseau, M.; Barrau, J. and Kalevcih, V. *Semicond. Sci. Technol.* **1997**, *12*, 380.
- [5] Malinowski, A. and Harley, R. T. *Phys. Rev. B* **2000**, *62*, 2051.
- [6] Bastard, G., "Wave mechanics applied to semiconductor heterostructure", Monographies de Physique, Les Editions de Physique, Les Ulis Cedex

## Mesoscopic g-factor renormalization for electrons in III-V interacting nanolayers

M. A. Toloza Sandoval, J. E. Leon Padilla, 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, 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 8 June 2018; revised manuscript received 15 July 2018; published 28 August 2018)

The physics of the renormalization of the effective electron g factor by the confining potential in semiconductor nanostructures is theoretically investigated. The effective g factor for electrons in structures with interacting nanolayers, or coupled quantum wells (QWs), is obtained with an analytical and yet accurate multiband envelope-function solution, based on the linear  $8 \times 8 k \cdot p$  Kane model for the bulk band structure. Both longitudinal and transverse applied magnetic fields are considered and the g-factor anisotropy (i.e., the difference between the two field configurations) is analyzed over the entire space spanned by the two structure parameters: the thickness of the active layers and the thickness of the tunneling barrier separating them. Two-dimensional anisotropy maps are constructed for symmetric and asymmetric InGaAs coupled QWs, with InP tunneling barriers, that reproduce exactly known single-layer or QW results, in different limits. The effects of the structure inversion asymmetry on the mesoscopic g-factor renormalization are also discussed, in particular the negative anisotropies for thin-layer structures. Such multilayer structures form an excellent testing ground for the theory, and the analytical solution presented, which is perfectly consistent over the whole space of parameters, leads to helpful expressions and can guide further research on the mechanisms of this mesoscopic renormalization.

DOI: [10.1103/PhysRevB.98.075312](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.075312)

### I. INTRODUCTION

Simple GaAs/AlGaAs quantum wells (QWs) represent the ultimate testing system for quantum confinement effects and fundamental methods in condensed-matter physics. For instance, the energy quantization and the validity of the envelope-function approximation have been verified in these nanostructures with great accuracy [1]. Semiconductor QWs support two-dimensional electron gases (2DEGs) and are applied in a large number of electronic devices, in particular lasers and photodetectors, with operation frequencies tuned by the well width  $L_w$  [2]. More recently, high-quality structures with tunnel-coupled QWs have been fabricated and used in problems and applications in the physics of exciton liquids [3], topological transitions [4], and special field-effect transistors [5], for example. Considering the 1D dynamics along the growth axis, a double quantum well (DQW) behaves with respect to the constituent QWs similarly to a diatomic molecule with respect to the atoms. These DQW structures support interacting 2DEGs and allow for tunneling effects used, for instance, to control the charge transfer between the active layers. With respect to single QWs, DQWs form more general quantum structures with at least two independent parameters:  $L_w$  and  $L_b$ , the active layers' width and that of the barrier in between, which is the inverse of the tunnel-coupling parameter. The single QW limit of the DQW structures, both when  $L_b = 0$  and when it is sufficiently large (so that the interwell coupling is negligible), is a condition of particular interest in the

modeling of fine quantum confinement effects, as the g-factor renormalization and the corresponding Zeeman splitting in such nanostructures.

Due to the increasing interest in spintronics [6] and in new schemes for quantum computation, including the detection of Majorana fermions [7], much attention has been given lately to the renormalization of the electron g factor in semiconductor nanostructures [8–18]. The mesoscopic confining potential in semiconductor nanostructures further renormalizes the bulk effective g factor (already renormalized from the bare value 2) and introduces extra anisotropies, transforming scalar g factors into tensors. The g-factor engineering starts to be a fundamental part of semiconductor physics [19]; however, it is still largely based only on the Roth formula for the bulk [20] and, before achieving the desired control in nanostructures (quantum wells, wires, etc.), the problems found when modeling and measuring this mesoscopic renormalization in simple III-V QWs need to be solved.

After the work of many groups [21–40], it is by now well established that the ground-state effective g factor for electrons confined in regular GaAs-like QWs ( $g^{QW}$ ) varies with  $L_w$  interpolating from the bulk barrier (AlGaAs) to the bulk well (GaAs) g factors, when  $L_w$  goes from zero to a sufficiently large value; and that between these two bulk limits,  $g^{QW}(L_w)$ , depends on the magnetic-field orientation. The difference in the QW g factor between the magnetic-field orientations perpendicular and parallel to the interfaces gives the g-factor main anisotropy  $\Delta g^{QW}$  ( $=g_{\parallel} - g_{\perp}$ ) which is the most direct

and critical signature of the quantum confinement, and has been much investigated both theoretically [13,14,17,22,41] and experimentally [8,24,26,32,39]. QW structures made out of different compounds were investigated and it is known, for example, that except for very thin asymmetric wells [13], electrons in GaAs-like QWs have a positive anisotropy, i.e.,  $g_{\parallel} > g_{\perp}$ , where  $g_{\parallel}$  refers to an in-plane magnetic field configuration, while  $g_{\perp}$  to a magnetic field along the growth direction (note, however, that the opposite definition of anisotropy is also used in the literature). The  $L_w$  dependence of the anisotropy is more interesting. In symmetric QWs, the anisotropy must satisfy strict bulk limits that impose  $\Delta g^{\text{QW}}(L_w = 0)$  and  $\Delta g^{\text{QW}}(L_w \rightarrow \infty)$  both exactly zero, and present a critical  $L_w$  with maximum (or minimum)  $\Delta g^{\text{QW}}$ . However it has not been easy to observe and verify these properties. Experimentally, special conditions for the electron spin resonance [24] or sophisticated time-resolved techniques [26,32] have been necessary and, nevertheless,  $\Delta g^{\text{QW}}$  has been measured only with large uncertainties and a small number of samples.

From the theoretical point of view, despite the need of corrections due to the remote bands, the envelope-function approximation based on the eight-band Kane model remains the most promising approach, in particular to obtain general results and expressions, with simple physical interpretations. However, with this same approach, there are different approximate solutions for the effective g factor [22,24,31,41]. The simple analytical solution proposed in Ref. [41] (see also Ref. [13] for details) has the advantages of satisfying exactly the above-mentioned bulk conditions in  $\Delta g^{\text{QW}}$  and of leading to useful expressions, but has been applied only to single layers or QWs. The extension and application of such solution to more complex and general structures, including, for example, competing structure inversion asymmetry (SIA) and tunneling effects, is a critical test of the theory and a clear step forward in our understanding of the mesoscopic g-factor renormalization.

This is what we do here: a detailed and complete solution for the electron effective g factor in symmetric and asymmetric III-V interacting layers or DQW structures. The obtained results are perfectly coherent over the entire space of the structure parameters, exactly reproduce known single QW results in the two corresponding limits, and include helpful expressions and recipes for the estimation/calculation of the effective g factor in general III-V nanostructures. The interacting features observed between the noninteracting (single QW) limits, as well as the effects of SIA, are simply explained in terms of the Rashba spin-orbit coupling and the electron wave function in these structures. As a specific example, 2D anisotropy maps  $\Delta g^{\text{DQW}}(L_w, L_b)$  are constructed for symmetric InP/InGaAs/InP/InGaAs/InP and asymmetric insulator/InGaAs/InP/InGaAs/InP multilayer structures, and discussed in detail. Next we present and discuss the model calculation and then the results, before giving a summary of the main conclusions.

## II. THEORETICAL MODEL

A general anisotropic Zeeman response to an applied magnetic field  $\vec{B}$  is described by an effective g-factor tensor  $g_{ij}^*$  defined by the following Zeeman term in the electron effective

Hamiltonian:

$$\mathcal{H}_Z^* = \frac{\mu_0}{2} \sigma_i g_{ij}^* B_j, \quad (1)$$

with  $i, j = x, y, z$ ,  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  being the Pauli matrices spin vector, and  $\mu_0 = e\hbar/2m_0$  the Bohr magneton, with  $e$  and  $m_0$  being the free-electron charge and mass. In 2D structures (QWs, DQWs, etc.) of the nine independent elements of  $g^*$ , only two are nonzero in the first order:  $g_{\parallel}$  and  $g_{\perp}$ , diagonal elements corresponding to magnetic fields parallel and perpendicular, respectively, to the interfaces. In this approximation, we neglect the much smaller off-diagonal elements, which include the in-plane anisotropy. We also neglect the bulk k-cubic Dresselhaus spin-orbit coupling contribution, which in these InGaAs QWs is much smaller than the Rashba one [8,42,43].

Starting with the applied magnetic field  $\vec{B}$  parallel to the interfaces (say in the  $y$  direction, with the growth direction along  $z$ ), the following effective Hamiltonian for electrons in 2D structures can be easily derived from the linear  $8 \times 8$  Kane model [41]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(z, \varepsilon) = & -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon)} \frac{d}{dz} + \frac{1}{2} \frac{m_0^2}{m(z, \varepsilon)} \omega_c^2 (z - z_c)^2 \\ & + E_c(z) + \frac{\mu_0}{2} \sigma_y \left\{ g_0 - \frac{4m_0}{\hbar^2} \left[ \beta(z, \varepsilon) \right. \right. \\ & \left. \left. + (z - z_c) \frac{d}{dz} \beta(z, \varepsilon) \right] + \delta g_{\text{rem}}(z) \right\} B. \end{aligned} \quad (2)$$

All different terms above are easily recognized, the last one being the effective Zeeman interaction;  $g_0 (=2)$  is the bare electron g factor,  $\omega_c = eB/m_0$  is the cyclotron frequency,  $\beta(z, \varepsilon)$  is the spin-orbit coefficient,  $\frac{d}{dz} \beta = \alpha_R$  is the so-called Rashba coupling parameter [44–46],  $\delta g_{\text{rem}}(z)$  is the remote band's correction [47], and  $z_c = -\ell^2 k_x$  is the center of the cyclotron orbit with magnetic length  $\ell = \sqrt{\hbar/eB}$  (note that the Hamiltonian does not depend on  $x$ , so that a plane wave was chosen for the  $x$ -dependent part of the wave function). In addition,  $E_c(z)$  describes the conduction-band-edge profile and, for completeness, we recall that the energy-dependent effective mass and spin-orbit coefficient are given by

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

and

$$\beta(z, \varepsilon) = \frac{P^2}{2} \left[ \frac{1}{\varepsilon - E_v(z)} - \frac{1}{\varepsilon - E_v(z) + \Delta(z)} \right], \quad (4)$$

where  $P$  is the Kane matrix element,  $E_v(z)[=E_c(z) - E_g(z)]$  stands for the valence-band edge profile, and  $\Delta$  is the valence-band spin-orbit energy splitting. Note that in the flat-band case considered here,  $\beta$  is a piecewise constant function of  $z$ , changing at each heterostructure interface where  $\alpha_R$  behaves as a  $\delta$  function.

It is easy to check that the above effective Hamiltonian (2) exactly satisfies three well-known and fundamental limits: bulk (no  $z$  dependence), no spin orbit ( $\beta = 0$ ), and zero field ( $B = 0$ ). More important here though is that in the limit of  $B \rightarrow 0$ ,  $g_{\parallel}$  can be obtained in first-order perturbation theory. One simply computes the expectation value  $\langle \mathcal{H}_Z^* \rangle_{\psi_0}$  with the unperturbed

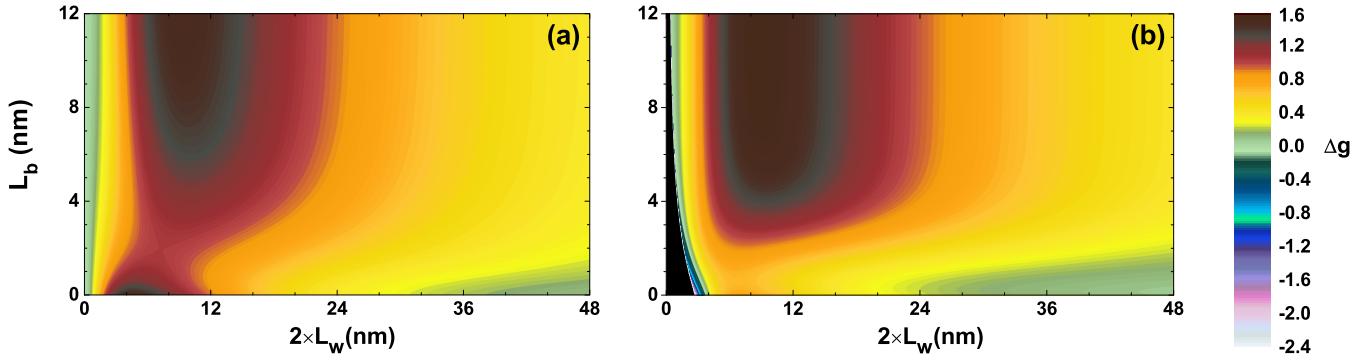


FIG. 1. 2D maps of the g-factor anisotropy for electrons in (a) symmetric and (b) asymmetric InGaAs/InP DQW structures. The anisotropy is given by the color code on the right. Among other features discussed in the text, note the large negative values of the anisotropy in asymmetric structures with very thin layers, in the lower left angle of the map, right next to the black area on the left, which is the region with no bound states allowed. For the band profile and parameters, please see Figs. 2 and 3.

eigenstate  $\psi_0$  (with energy  $\varepsilon_0$ ). The unperturbed problem is that for  $B = 0$ , i.e.,  $\mathcal{H}^*(B = 0)|\psi_0\rangle = \varepsilon_0|\psi_0\rangle$ . By recalling that in an undoped (flat-band) structure  $\beta(z)$  is given by a step function, with discontinuous jumps at each interface (where it changes from one bulk value to another), one clearly sees that  $g_{\parallel} = \langle g_{\text{bulk}} \rangle_{\psi_0} + \Delta g^{2D}$ , i.e., the sum of the bulk average plus an interface contribution [41],

$$\Delta g^{2D} = (4m_0/\hbar^2)\langle\alpha_R(z, \varepsilon_0)(z_0 - z)\rangle_{\psi_0}, \quad (5)$$

where  $z_0 = \langle z \rangle_{\psi_0}$ . Even for 2D structures with band profiles far from flat, there is always the  $\alpha_R \neq 0$  contribution at the interfaces, which is proportional to  $\delta\beta = \beta_w - \beta_b$ , the only one for flat bands and often the dominant one. Since the bulk average is independent of the field and/or growth orientation,  $\Delta g^{2D}$  is identified as the g-factor anisotropy because, in the same order of approximation, one finds  $g_{\perp} = \langle g_{\text{bulk}} \rangle_{\psi_0}$ . Despite the larger symmetry, the theory for the perpendicular configuration is less straightforward [13,31]; nevertheless, the result could not be simpler, more reasonable, and in better agreement with the experiments [23,25,26,32,36]. In a more usual form, the averaged  $g_{\text{bulk}}$  can be written in terms of the main parameters as

$$g_{\perp} = g_0 - \sum_{i=b,w} \left[ \frac{m_0}{m_i(\varepsilon_0)} \frac{2\Delta^{(i)}}{3\varepsilon_g^{(i)}(\varepsilon_0) + 2\Delta^{(i)}} - \delta g_r^{(i)} \right] P_i, \quad (6)$$

where  $P_i$  is the probability to find the electron in the layers  $i$  (well or barrier). It is an expectation value of the bulk g factor calculated, however, with an (energy-dependent) effective gap  $\varepsilon_g^{(i)}(\varepsilon_0)$  ( $= \varepsilon_0 - E_c^{(i)} + E_g^{(i)}$ ); this formula generalizes that of Roth *et al.* for the bulk [20] and is part of our analytical solution for the g-factor renormalization in 2D structures. It is particularly useful when the electron density of probability is concentrated in the active layers only, so that  $g_{\perp}$  is determined by the confinement energy shift only, as already observed experimentally [36]. The known bulk formula is recovered in limits of  $L_w \rightarrow 0$  and of sufficiently large  $L_w$ , when  $\varepsilon_g^b(\varepsilon_0) \rightarrow E_g^b$  (with  $P_w = 0$  and  $P_b = 1$ ) and  $\varepsilon_g^w(\varepsilon_0) \rightarrow E_g^w$  (with  $P_w = 1$  and  $P_b = 0$ ), respectively [note that the energy-dependent effective mass also goes to the bulk band-edge effective mass,

i.e., in these bulk limits, one has, respectively,  $m_b(\varepsilon_0) = m_b^*$  and  $m_w(\varepsilon_0) = m_w^*$ ].

### III. RESULTS AND DISCUSSION

As a practical example, let us consider InP/InGaAs/InP/InGaAs/InP symmetric DQWs and insulator/InGaAs/InP/InGaAs/InP asymmetric DQWs structures, which depend on the same set of parameters, given by the width of the InGaAs and (middle) InP nanolayers,  $L_w$  and  $L_b$ , plus their bulk band parameters and band offset, and can then be better compared in order to assess the effects of SIA on this mesoscopic renormalization.

The recipe is then as follows: for each point in the space spanned by the two varying parameters,  $L_w$  and  $L_b$ , we (1) solve the unperturbed problem to obtain  $\psi_0$  and  $\varepsilon_0$ , the wave function and energy of the ground state of the Kane's DQW problem; then, (2) calculate  $z_0 = \langle z \rangle_{\psi_0}$  and the probabilities  $P_i = \int_i |\psi_0|^2 dz$ ; and, finally, (3) substitute them into the equations above and get  $\Delta g^{\text{DQW}}$ ,  $g_{\perp}^{\text{DQW}}$ , and  $g_{\parallel}^{\text{DQW}}$ .

With a color code, Fig. 1 shows the obtained anisotropy maps for symmetric [Fig. 1(a)] and asymmetric [Fig. 1(b)] DQW structures, showing rich landscapes with qualitative differences, particularly in the strong-coupling regime at the small- $L_b$  region. Note first that for the symmetric structures (SDQWs), the  $L_w$  dependence of the anisotropy for different values of  $L_b$  always satisfies the bulk conditions; i.e., independent of  $L_b$ , the g-factor anisotropy goes indeed to zero as  $L_w \rightarrow 0$  or  $\infty$ , and that  $\Delta g$  presents always a single maximum, limited though by the maximum  $\Delta g^{\text{QW}}$ . By increasing the width of the InP barrier between the InGaAs nanolayers, a continuous crossover from one noninteracting single QW limit to another is obtained (i.e., from a  $2L_w$  wide QW to an  $L_w$  one); one exactly obtains  $\Delta g^{\text{SDQW}}(L_w, L_b = 0) = \Delta g^{\text{QW}}(2L_w)$  and  $\Delta g^{\text{SDQW}}(L_w, L_b \rightarrow \infty) = \Delta g^{\text{QW}}(L_w)$ .

Probably the most interesting difference seen in asymmetric DQWs is the large negative anisotropies (down to  $\Delta g = -2.4$ ) seen in the small area at the lower-left angle of the map, corresponding to thin-layer structures, just on the right of the black area, which is the region of the asymmetric structures with no allowed bound states. The differences in g-factor anisotropy

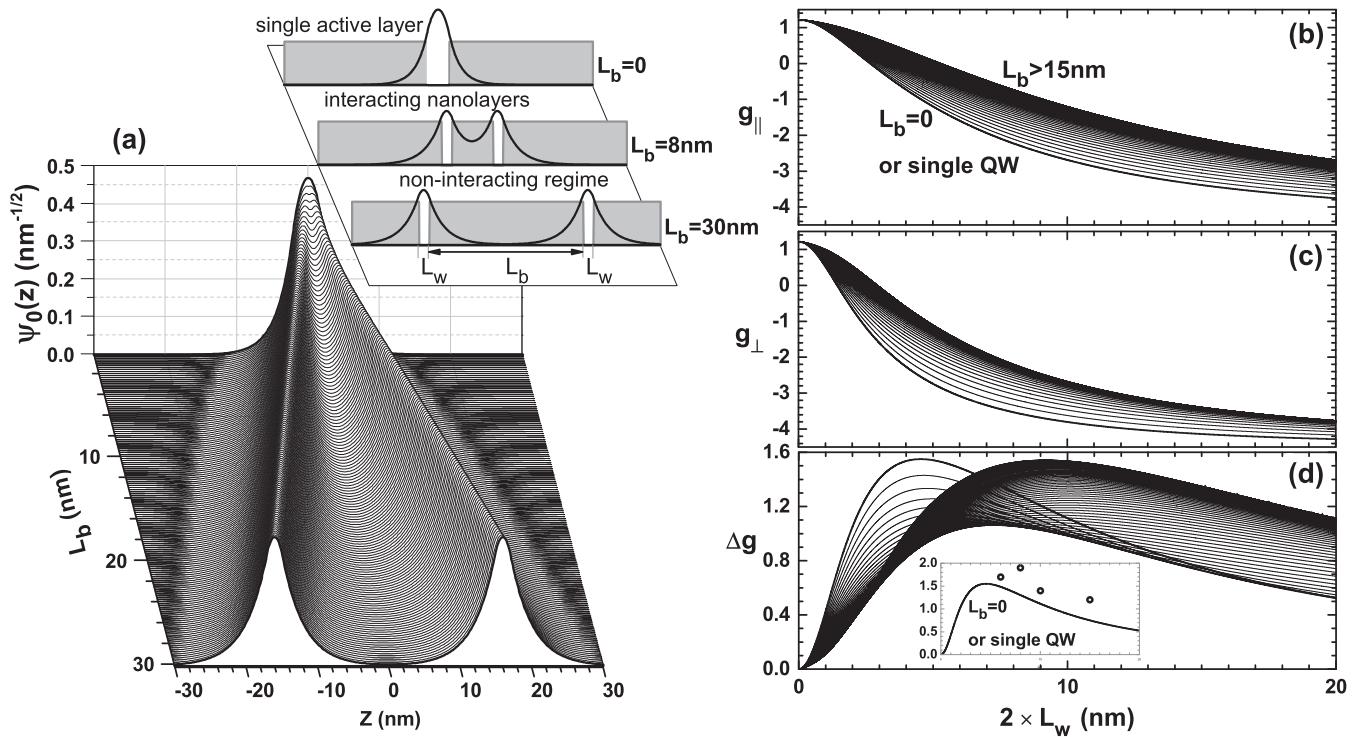


FIG. 2. Detailed results for the effective  $g$  factor of electrons in InGaAs/InP symmetric DQW structures, illustrated in the inset, with examples of the three different interacting regimes, corresponding to interwell barrier width  $L_b$  zero, intermediate, and sufficiently large;  $L_w = 2$  nm. Layers of InP and  $In_{0.53}Ga_{0.47}$  As are considered with the following parameters:  $E_g^{InP} = 1.424$  eV,  $\Delta_{so}^{InP} = 0.108$  eV,  $g_{InP}^* = 1.2$ ; and  $E_g^{InGaAs} = 0.813$  eV,  $\Delta_{so}^{InGaAs} = 0.326$  eV,  $g_{InGaAs}^* = -4.5$ , and  $m_{InGaAs}^* = 0.041 m_e$ ; [48] with a conduction-band offset of 0.25 eV [49]. It is plotted in (a)  $\psi_0(z)$ , and, as a function of  $L_w$ ,  $g_\perp$ ,  $g_\parallel$ , and  $\Delta g$ , in (b)–(d), respectively. In (a),  $L_b$  varies from zero (on top) up to 30 nm (bottom) in units of 0.2 nm, used also in the other plots. In (d), one sees the anisotropy  $\Delta g^{SDQW}$  interpolating from one single QW limit to another, as  $L_b$  goes from zero up to a sufficiently large value, as discussed in the text, and the inset shows the comparison with available experimental data [24].

between SDQWs and ADQWs are better understood with their corresponding explicit expressions. In flat-band structures, the expectation value in Eq. (5) is easily computed and  $\Delta g^{2D}$  is seen to be given in terms of the density of probability  $\mathcal{P}$  ( $=|\psi_0|^2$ ) at the different interfaces. In SDQWs, there are only two nonequivalent interfaces, called 1 and 2, and one gets

$$\Delta g^{SDQW} = [(\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_1)L_b + 2\mathcal{P}_2 L_w] \frac{4m_0 \delta\beta}{\hbar^2}, \quad (7)$$

with the  $z$  origin taken at the middle of the structure (see Fig. 2); thus,  $z_0 = 0$ ,  $\mathcal{P}_1 = |\psi_0(L_b/2)|^2$ , and  $\mathcal{P}_2 = |\psi_0(L_w + L_b/2)|^2$ . In the ADQWs considered here, instead, with the  $z$  origin taken at the leftmost infinite barrier with  $|\psi_0(z=0)|^2 = 0$  (see Fig. 3), three nonequivalent interfaces contribute (at  $z = L_w, L_w + L_b, 2L_w + L_b$ ), and numbering them from the left, one gets

$$\begin{aligned} \Delta g^{ADQW} = & [(\mathcal{P}_3 - \mathcal{P}_2 + \mathcal{P}_1)(L_w - z_0) \\ & + (\mathcal{P}_3 - \mathcal{P}_2)L_b + \mathcal{P}_3 L_w] \frac{4m_0 \delta\beta}{\hbar^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

These expressions complete the analytical solution and make clear each feature of the maps in Fig. 1, with a look at the corresponding  $\psi_0$ , as well as at the individual elements  $g_\perp$  and  $g_\parallel$ . See, for instance, the results in Figs. 2 and 3 for  $L_w = 2$  nm SDQWs and ADQWs, respectively, with varying

$L_b$  in a fine grid (0.2 nm), where (a) shows  $\psi_0(z)$ , (b)  $g_\perp$ , (c)  $g_\parallel$ , and (d)  $\Delta g$ , and the insets give examples of the three different interacting regimes, i.e., the noninteracting single QW, in the limits of  $L_b = 0$  and  $L_b \gg L_w$ , and the coupled regime in between.

The SDQW and ADQW  $\psi_0$  are quite different; in ADQWs,  $|\psi_0|^2$  is always concentrated in only one layer (that on the right, far from the large barrier on the left), while in SDQWs, it splits equally between the two. To this corresponds an important qualitative difference also in  $z_0$  as a function of  $L_w$  and  $L_b$ ; while it is always zero in SDQWs, in ADQWs instead it does vary significantly and is responsible for the negative anisotropies in very thin-layer structures. In such thin-layer limit,  $\psi_0$  describes states with energy close to the top of the InP barrier, near the region with no allowed bound states, and strongly feels the asymmetry of the confining potential. For this reason, the SDQW and ADQW results in this regime present larger contrast, and the ADQW  $z_0$  is pushed away from the larger barrier, leading to the negative anisotropies.

Experimentally, the  $g$ -factor renormalization in InGaAs nanolayers has been investigated by Kowalski *et al.* [24] and, more recently, also by Herzog *et al.* [8]. The large confinement-induced anisotropy of the  $g$  factor in InGaAs QWs was confirmed in both studies. Modulation doping structures were used and a direct comparison with theory would require precise knowledge of the structure parameters and its self-consistent

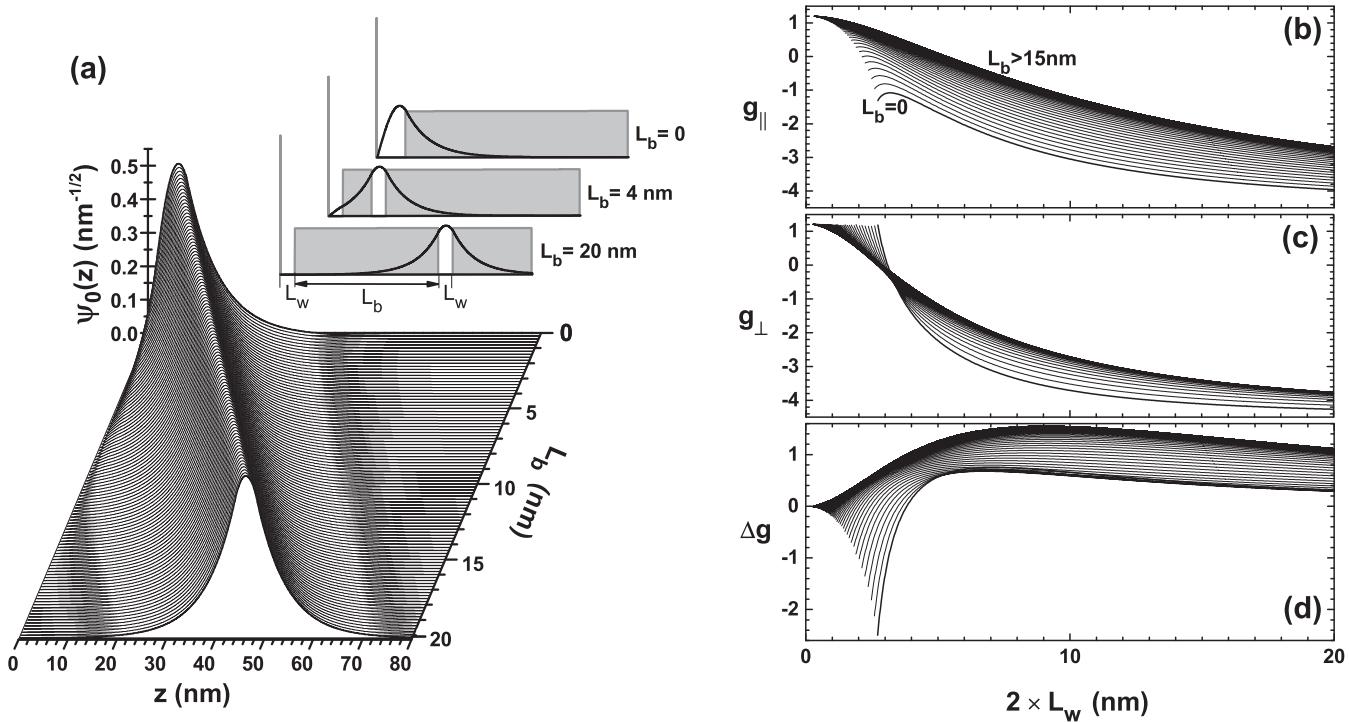


FIG. 3. Unperturbed wave function and renormalized effective g factors for asymmetric DQW structures of the type insulator/InGaAs/InP/InGaAs/InP, illustrated in the inset.  $L_w$  and  $L_b$  give the width of the InGaAs active layers and that of the tunneling InP barrier. The parameters used were as in Fig. 2. The differences seen with respect to the SDQW results derive from the SIA and are explained with the Rashba spin-orbit coupling in these structures (see the discussion in the text).

band profile. Nevertheless, in the inset of Fig. 2(d), we compare our flat-band results with the plain data of Ref. [24] and obtain a reasonably good agreement, as the one already shown for GaAs systems [41]. Note that the curve in the inset is for symmetric QWs, which, for this experimental  $L_w$  range, coincide with the results for the asymmetric QWs considered here. However, studies of samples with symmetric and asymmetric InGaAs DQW structures are still necessary in order to fully verify the above predictions for the large g-factor renormalization and anisotropy in these structures with interacting nanolayers.

#### IV. CONCLUSIONS

Summarizing, we have solved the g-factor renormalization in III-V semiconductor DQW structures, within the multiband envelope function and perturbation approximations using the  $8 \times 8$  Kane model for the bulk. Symmetric and asymmetric structures have been considered. Useful expressions are derived which explain well the available experimental data, and are applied to calculate the main effective g-factor components for electrons in InP/InGaAs/InP/InGaAs/InP SDQWs and

insulator/InGaAs/InP/InGaAs/InP ADQWs. With the resulting g-factor anisotropy as a function of the InGaAs-layer width and the middle InP-layer width, 2D maps were then constructed and compared to assess the effects of SIA on the g-factor mesoscopic renormalization. The qualitative differences are simply explained with the structure's unperturbed wave function  $\psi_0$ . Besides the specific numerical predictions for the InGaAs DQW structures, the overall consistency of the results, shown over the whole space of the structure's parameters, and the general expressions derived give enough ground to believe that the present simple and transparent calculation can guide/help further research to fully understand the mesoscopic renormalization of the electron g factor in nanostructures.

#### ACKNOWLEDGMENTS

E.A.A.S. is thankful to the Scuola Normale Superiore di Pisa for the kind hospitality. Support from the Brazilian agencies FAPESB, FAPESP (Grant No. 2016/03854-9), CAPES, and CNPq is also acknowledged.

[1] G. Bastard, J. Brum, and R. Ferreira, in *Semiconductor Heterostructures and Nanostructures*, Solid State Physics, Vol. 44, edited by H. Ehrenreich and D. Turnbull (Academic, New York, 1991), pp. 229–415.

[2] H. Kroemer, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 783 (2001).  
[3] M. Stern, V. Umansky, and I. Bar-Joseph, *Science* **343**, 55 (2014).  
[4] S. S. Krishtopenko, W. Knap, and F. Teppe, *Sci. Rep.* **6**, 30755 (2016).

- [5] X. G. Peralta, S. J. Allen, M. C. Wanke, N. E. Harff, J. A. Simmons, M. P. Lilly, J. L. Reno, P. J. Burke, and J. P. Eisenstein, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 1627 (2002).
- [6] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [7] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, *Science* **336**, 1003 (2012).
- [8] F. Herzog, H. Hardtdegen, T. Schäpers, D. Grundler, and M. A. Wilde, *New J. Phys.* **19**, 103012 (2017).
- [9] A. Tadjine, Y.-M. Niquet, and C. Delerue, *Phys. Rev. B* **95**, 235437 (2017).
- [10] F. Qu, J. van Veen, F. K. de Vries, A. J. A. Beukman, M. Wimmer, W. Yi, A. A. Kiselev, B.-M. Nguyen, M. Sokolich, M. J. Manfra, F. Nichele, C. M. Marcus, and L. P. Kouwenhoven, *Nano Lett.* **16**, 7509 (2016).
- [11] X. Mu, G. Sullivan, and R.-R. Du, *Appl. Phys. Lett.* **108**, 012101 (2016).
- [12] V. V. Belykh, D. R. Yakovlev, J. J. Schindler, E. A. Zhukov, M. A. Semina, M. Yacob, J. P. Reithmaier, M. Benyoucef, and M. Bayer, *Phys. Rev. B* **93**, 125302 (2016).
- [13] M. A. Toloza Sandoval, E. A. de Andrade e Silva, A. Ferreira da Silva, and G. C. La Rocca, *Semicond. Sci. Technol.* **31**, 115008 (2016).
- [14] M. Li, Z.-B. Feng, L. Fan, Y. Zhao, H. Han, and T. Feng, *J. Magn. Magn. Mater.* **403**, 81 (2016).
- [15] M. Pakmehr, A. Khaetskii, B. D. McCombe, N. Bhandari, M. Cahay, O. Chiatti, S. F. Fischer, C. Heyn, and W. Hansen, *Appl. Phys. Lett.* **107**, 082107 (2015).
- [16] L.-W. Yang, Y.-C. Tsai, Y. Li, A. Higo, A. Murayama, S. Samukawa, and O. Voskoboynikov, *Phys. Rev. B* **92**, 245423 (2015).
- [17] E. Ridolfi, E. A. de Andrade e Silva, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **91**, 085313 (2015).
- [18] A. V. Shchepetilnikov, Y. A. Nefyodov, I. V. Kukushkin, L. Tiemann, C. Reichl, W. Dietsche, and W. Wegscheider, *Phys. Rev. B* **92**, 161301 (2015).
- [19] H. Kosaka, A. Kiselev, F. Baron, K. Wook Kim, and E. Yablonovitch, *Electron. Lett.* **37**, 464 (2001).
- [20] L. M. Roth, B. Lax, and S. Zwerdling, *Phys. Rev.* **114**, 90 (1959).
- [21] T. P. Smith III and F. F. Fang, *Phys. Rev. B* **35**, 7729 (1987).
- [22] E. L. Ivchenko and A. A. Kiselev, *Sov. Phys. Semicond.* **26**, 827 (1992).
- [23] 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).
- [24] B. Kowalski, P. Omling, B. K. Meyer, D. M. Hofmann, C. Wetzel, V. Härlé, F. Scholz, and P. Sobkowicz, *Phys. Rev. B* **49**, 14786 (1994).
- [25] R. Hannak, M. Oestreich, A. Heberle, W. Röhle, and K. Köhler, *Solid State Commun.* **93**, 313 (1995).
- [26] P. Le Jeune, D. Robart, X. Marie, T. Amand, M. Brosseau, J. Barrau, and V. Kalevcih, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 380 (1997).
- [27] E. Ivchenko, A. Kiselev, and M. Willander, *Solid State Commun.* **102**, 375 (1997).
- [28] Q. X. Zhao, M. Oestreich, and N. Magnea, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 3704 (1996).
- [29] A. A. Sirenko, T. Ruf, M. Cardona, D. R. Yakovlev, W. Ossau, A. Waag, and G. Landwehr, *Phys. Rev. B* **56**, 2114 (1997).
- [30] A. A. Kiselev, E. L. Ivchenko, and U. Rössler, *Phys. Rev. B* **58**, 16353 (1998).
- [31] A. A. Kiselev, K. W. Kim, and E. L. Ivchenko, *Phys. Status Solidi (b)* **215**, 235 (1999).
- [32] A. Malinowski and R. T. Harley, *Phys. Rev. B* **62**, 2051 (2000).
- [33] R. Kotlyar, T. L. Reinecke, M. Bayer, and A. Forchel, *Phys. Rev. B* **63**, 085310 (2001).
- [34] X. C. Zhang, K. Ortner, A. Pfeuffer-Jeschke, C. R. Becker, and G. Landwehr, *Phys. Rev. B* **69**, 115340 (2004).
- [35] M. de Dios-Leyva, E. Reyes-Gómez, C. A. Perdomo-Leiva, and L. E. Oliveira, *Phys. Rev. B* **73**, 085316 (2006).
- [36] I. A. Yugova, A. Greilich, D. R. Yakovlev, A. A. Kiselev, M. Bayer, V. V. Petrov, Y. K. Dolgikh, D. Reuter, and A. D. Wieck, *Phys. Rev. B* **75**, 245302 (2007).
- [37] P. Pfeffer and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **74**, 115309 (2006).
- [38] P. Pfeffer and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **74**, 233303 (2006).
- [39] S. Tomimoto, S. Nozawa, Y. Terai, S. Kuroda, K. Takita, and Y. Masumoto, *Phys. Rev. B* **81**, 125313 (2010).
- [40] A. Bruno-Alfonso, F. E. López, N. Raigoza, and E. Reyes-Gómez, *Eur. Phys. J. B* **74**, 319 (2010).
- [41] M. A. Toloza Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrade e Silva, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **86**, 195302 (2012).
- [42] E. A. de Andrade e Silva, *Phys. Rev. B* **46**, 1921 (1992).
- [43] P. S. Eldridge, J. Hübner, S. Oertel, R. T. Harley, M. Henini, and M. Oestreich, *Phys. Rev. B* **83**, 041301 (2011).
- [44] L. G. Gerchikov and A. V. Subashiev, *Sov. Phys. Semicond.* **26**, 73 (1992).
- [45] E. A. de Andrade e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **50**, 8523 (1994).
- [46] E. de Andrade e Silva, G. La Rocca, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* **55**, 16293 (1997).
- [47] The remote bands correction is the difference between the known bulk g factor and that given by the eight-band Kane model, which is added to the effective Hamiltonian so that it will give the correct g factor in the two bulk limits of the structure. In InGaAs, it is of 30% (i.e., 1.36/4.5) and in InP of 20% (0.24/1.2).
- [48] O. Madelung, W. von der Osten, and U. Rössler, in *Landolt-Bornstein New Series*, edited by O. Madelung, Vol. 3/22a (Springer, Berlin, 1987).
- [49] J. Davies, *Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).

# g-Factor Anisotropy Inversion in InGaAs 2D Nanostructures

Jhon Elber Leon Padilla, Marcelo Alejandro Toloza Sandoval, Antonio Ferreira da Silva, Erasmo Assumpção de Andrada e Silva,\* and Giuseppe Carlo La Rocca

The inversion or sign change of the electron g-factor anisotropy in thin-layer semiconductor nanostructures is investigated theoretically and gauged for InGaAs asymmetric single and double quantum wells (QWs). The g-factor anisotropy in these 2D nanostructures is given by the difference between the longitudinal and transverse components; it is a fine sensor of the confining potential and in InGaAs structures it is determined by the Rashba spin-orbit coupling. In the presence of structure inversion asymmetry (SIA) the g-factor anisotropy is expected to invert at a critical well width. This effect can be useful technologically and is here analyzed in detail with InGaAs/InP asymmetric multi-layer structures. The g-factor anisotropy in these structures is calculated in a fine grid around the inversion point, using 8-band kp Kane model based envelope function theory for the nanostructure, and perturbation theory for the calculation of the effective g factor. It is shown that the anisotropy inversion can be seen only in asymmetric structures with very thin layers, near the limit of no bound states allowed, and corresponding to the electron being pushed out of the confining region. The inversion point, or critical well width for the g-factor anisotropy inversion in Insulator/InGaAs/InP QWs is determined to be  $\approx 4\text{ nm}$ . For double or coupled QWs it is found that the inversion can be observed only with very thin tunneling barriers around 1 nm wide.

g factor, which determines the electronic response of the system to an external magnetic field. In nanostructures, the electron g factor is further renormalized from that of the bulk<sup>[1]</sup> by the mesoscopic confining potential and can therefore be tuned for specific devices functionalities.

The nanostructure confining potential introduces new anisotropies and turns bulk scalar g factors into tensors. For instance in layered or 2D structures (e.g., quantum wells (QWs), double QWs, and multi-barrier structures with confining potential varying along the growth direction only), one finds in first order only two non-zero components of the g-factor tensor, corresponding to the longitudinal and transverse configurations of the applied field.<sup>[2–4]</sup> The difference between them gives the g-factor anisotropy and is the main effect of the mesoscopic g-factor renormalization in 2D structures, representing also a fine measure of the corresponding confining potential.

The electronic structure of III-V narrow-gap semiconductor QWs has been much investigated in part in view of spintronic applications, and it is well known for example that in these structures the Rashba term dominates the spin-orbit (SO) coupling for the confined electrons,<sup>[5,6]</sup> determining also the mesoscopic renormalization of their effective g factors.<sup>[7]</sup>

It is then natural to ask what is the role or effect of the structure inversion asymmetry (SIA) in the mesoscopic renormalization of the g factor, and in particular, in the anisotropy of the effective g-factor, introduced by the confinement in these structures.

It was recently shown that in structures with SIA and very thin layers, the g-factor anisotropy is expected to change sign, that is, to invert.<sup>[8]</sup> This effect can be used both for structure characterization and for applications. However, there is still no experimental observation nor a detailed analysis of this g-factor anisotropy inversion in real structures. In order to help clarify its microscopic mechanisms, and also to gauge its strength, it is presented here one such analysis with specific and accurate calculations for asymmetric InGaAs single and double QWs. The g-factor anisotropy for electrons in these structures is obtained in a fine grid of the structure

## 1. Introduction

One of the fundamental properties of the (mass, charge, and spin) carriers in semiconductor nanostructures is their effective

J. E. Leon Padilla, Dr. M. A. Toloza Sandoval, Prof. A. Ferreira da Silva  
Instituto de Física

Universidade Federal da Bahia  
40210-340 Salvador, Bahia, Brazil

Prof. E. A. de Andrada e Silva  
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais  
São José dos Campos, 12201-970 São Paulo, Brazil  
E-mail: erasmo.silva@inpe.br

Prof. G. C. La Rocca  
Scuola Normale Superiore and CNISM  
Piazza dei Cavalieri 7, I-56126 Pisa, Italy

 The ORCID identification number(s) for the author(s) of this article can be found under <https://doi.org/10.1002/pssb.201800643>.

DOI: 10.1002/pssb.201800643

parameters around the inversion point, which is then determined.

As a result, the inversion of the anisotropy is seen to happen when the width of the nanolayers is reduced until near the point in which the (asymmetric) structure does not support a bound-state anymore. Looking at the expectation value of the electron position, one sees how the anisotropy inversion corresponds to the electron being pushed out of the confining region.

For insulator/InGaAs/InP asymmetric single QWs, it is obtained that the g-factor anisotropy changes sign at a critical well width  $\approx 4$  nm. In the case of double QWs it is obtained that the inversion can be seen only in structures with thin tunneling barriers of the order of 1 nm, and this can also be understood with the expectation value of the electron position in the structure.

Next we present the model and the approximations used in the calculation, then the obtained results and discussions, and conclude with the summary of the main results.

## 2. Model for the g-Factor Anisotropy in III-V 2D Nanostructures

It is known that for electrons in InGaAs QWs the Rashba contribution is much bigger than the Dresselhaus one (see, e.g., ref. [6] for a recent measurement). Therefore, the electronic structure of these structures can be obtained quite accurately with an 8-band Kane model based envelope function calculation.

The electron effective g factor can be quite conveniently calculated (analytically) by projecting the multi-band effective Hamiltonian (including the applied magnetic field) into the conduction band space to obtain an effective Hamiltonian for the electrons with a corresponding effective Zeeman interaction term,<sup>[7,8]</sup> as was first done for  $B=0$  in refs. [9,10]. The obtained effective Zeeman term describing the anisotropic response to an applied magnetic field  $\mathbf{B}$  is written in terms of the effective g-factor tensor  $g_{ij}^*$ , that is,

$$H_Z^* = \frac{\mu_0}{2} \sigma_i g_{ij}^* B_j$$

where  $i,j=x,y,z$  ( $z$  here being along the growth direction),  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  being the Pauli matrices spin-vector, and  $\mu_0 = e\hbar/2m_0$  the Bohr magneton, with  $e$  and  $m_0$  being the free electron charge and mass, respectively.

The different components of the effective g factor are then calculated in the limit of  $B \rightarrow 0$ , using first order perturbation theory. For 2D structures one finds that out of the nine independent elements of  $g^*$  only two are non-zero:  $g_{||}$  and  $g_{\perp}$ , which are the diagonal elements corresponding to the magnetic field parallel and perpendicular to the interfaces. The g-factor anisotropy is defined as the difference, that is,

$$\Delta g^{2D} = g_{||}^* - g_{\perp}^*$$

and is simply given by the following expression<sup>[7,8]</sup>:

$$\Delta g^{2D} = (4m_0/\hbar^2) \langle a_R(z, \varepsilon_0)(z_0 - z) \rangle_{\psi_0} \quad (1)$$

where  $z_0$  is the position of the center of the cyclotron orbit,  $\varepsilon_0$  and  $\psi_0$  are the unperturbed ground state energy and envelope function,  $\langle \cdot \rangle_{\psi_0}$  means expectation value in the ground state  $\psi_0$ , and  $a_R$  is the Rashba coupling parameter given by<sup>[9-11]</sup>

$$a_R(z, \varepsilon) = \frac{P^2}{2} \frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{\varepsilon - E_c + E_g} - \frac{1}{\varepsilon - E_c + E_g + \Delta} \right] \quad (2)$$

where  $P$  is the usual conduction-valence band momentum matrix element, which is assumed constant (i.e., independent of  $z$ ), while  $E_c = E_c(z)$  gives the conduction band-edge profile of the structure,  $E_g = E_g(z)$  the semiconductor fundamental band gap along the growth direction, and  $\Delta = \Delta(z)$  the spin-orbit energy splitting in the valence-band.

Recall that  $P$  constant is the fundamental assumption of the envelope-function approximation; it corresponds to the neglect of any difference in the periodic part of the Bloch-functions of the two materials around the gap, guarantees continuity of the particle flux across the interfaces and is fixed (or given) by the measured conduction band effective mass  $m^*$  (of the well material), that is,  $P = \sqrt{\frac{\hbar^2}{m^*} E_g(E_g + \Delta)/(3E_g + 2\Delta)}$ .<sup>[11,12]</sup>

Lets consider an undoped (empty) QW and its lowest energy state for a bound electron. Minimization of the diamagnetic energy leads to the ground state being that with the center of the cyclotron orbit  $z_0$  given by the expectation value of the electron position, that is,

$$z_0 = \langle z \rangle_{\psi_0} = \int z |\psi_0|^2 dz$$

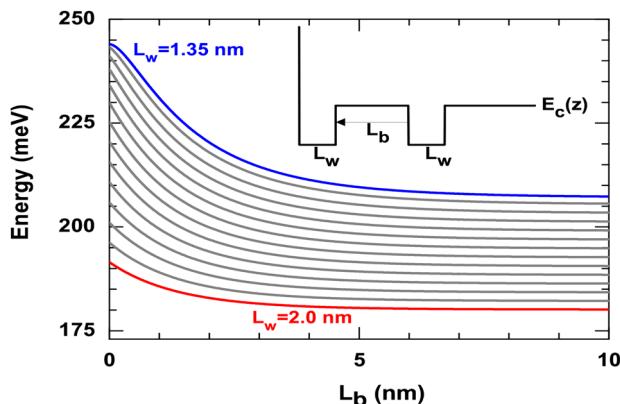
When the QW is symmetric for example,  $z_0$  clearly lays in the center of the well; and in fact, it is with the magnetic parabola there that one gets the lowest energy state. However, for asymmetric structures  $z_0$  is non-trivial and must be numerically calculated to be inserted in Equation (1) above, where it is clear that  $z_0$  is a critical g-factor anisotropy variable, in particular for the inversion.

The g-factor anisotropy can then be simply obtained by first solving the unperturbed (i.e., without external magnetic field) problem of the 2D structure ground state, and then with the solution and Equation (1) calculate  $\Delta g$ . In the flat-band case  $a_R(z, \varepsilon)$  is given by delta functions at each interface, and from Equation (1) one sees that the sign of the anisotropy will depend on the positions  $z_i$  of the interfaces relative to  $z_0$ .

## 3. Results for InGaAs Single and Double Asymmetric QWs

Lets now consider as a specific and practical example asymmetric structures with the band profile shown in the inset of Figure 1, representing Insulator/InGaAs/InP/InGaAs/InP multi-layer structures, with single QWs (with well width of  $2L_w$ ) when  $L_b = 0$ , and coupled ( $L_w$ ) QWs when  $L_b \neq 0$ . The Insulator/InGaAs interface on the extreme left is set as the origin of the  $z$ -coordinate, and treated as a perfect hard wall.

The unperturbed envelope-function problem can be easily solved by matching plane-waves at the interfaces, to obtain the



**Figure 1.** Ground state energy for bound electrons in a InGaAs/InP double quantum well structures with the conduction band profile as shown in the inset. Standard low temperature bulk (*InP* and  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ ) band parameters are used; namely  $E_g^{\text{InP}} = 1.424 \text{ eV}$ ,  $\Delta_{\text{so}}^{\text{InP}} = 0.108 \text{ eV}$ ,  $g_{\text{InP}}^* = 1.2$ ; and  $E_g^{\text{InGaAs}} = 0.813 \text{ eV}$ ,  $\Delta_{\text{so}}^{\text{InGaAs}} = 0.326 \text{ eV}$ ,  $g_{\text{InGaAs}}^* = -4.5$  and  $m_{\text{InGaAs}}^* = 0.041 m_e$ ; and a 0.25 eV conduction-band offset at the InGaAs/InP interface has also been used, see for instance ref. [5].

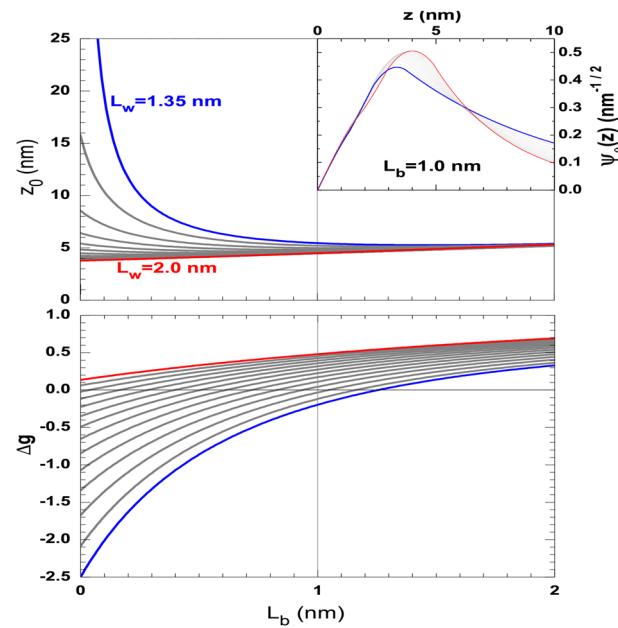
ground state wave-function  $\psi_0$  and energy  $\varepsilon_0$ .<sup>[12]</sup> Figure 1 shows the conduction band edge profile of the structure (in the inset) and the obtained ground state energies for the InGaAs structures studied here, close to the inversion point of the g-factor anisotropy.

The  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  composition with zero *InP* lattice-mismatch, that is, no strain, and standard low temperature bulk parameters listed in the caption of Figure 1, are used. The origin of the energy is set at the bottom of the conduction band of the well material and we note that these are all bound states, that is, with  $\varepsilon_0 < 250 \text{ meV}$ , equal to the barrier height (or conduction band off-set).

Then with  $\psi_0$  (shown in the inset of Figure 2) one calculates  $z_0$  and finally the anisotropy  $\Delta g$  by substituting all the results into Equation (1), and calculating the corresponding expectation value. Figure 2 shows the obtained results for  $z_0$  and  $\Delta g$  in these structures as a function of  $L_b$  (the width of the tunneling barrier) and for varying  $L_w$  in small units of 0.05 nm as in Figure 1. It is interesting to look first at the single QW ( $L_b = 0$ ) case, and to note that the g-factor anisotropy changes sign just below  $L_w = 2 \text{ nm}$ , corresponding to a QW with  $L = 4 \text{ nm}$ . In these InGaAs asymmetric QWs the critical well width for the inversion is then seen to be  $\approx 4 \text{ nm}$ , meaning that these QWs are predicted to have a positive g-factor anisotropy when the well width is  $> 4 \text{ nm}$ , and a negative one if  $L < 4 \text{ nm}$ .

Looking at the results for  $z_0$  on the upper part of the Figure, one sees that such anisotropy inversion happens indeed when  $z_0$  is close to the finite barrier interface (that on the right), which for  $L_w = 2 \text{ nm}$  is at  $z_i = 4 \text{ nm}$ . The absolute value of the negative anisotropy increases with further reduction of the well width, as  $z_0$  continues to grow well beyond the QW confining region, and up to a maximum anisotropy  $\Delta g$  of  $-2.5$ , corresponding to the limiting QW width  $L = 2L_w = 2.7 \text{ nm}$ , below which there is no allowed bound states in the structure. It is again interesting to see in the upper part of the Figure that to this limit corresponds a diverging  $z_0$ .

Lets now consider the case of coupled QWs, that is, with  $L_b \neq 0$ . Two main effects are observed when increasing  $L_b$  from zero: 1)



**Figure 2.** (Top) Position of the center of cyclotron orbit, given by the expectation value of the electron position, as a function of the inter-well barrier width  $L_b$  and for varying  $L_w$  in units of 0.05 nm; (Bottom) Obtained effective g-factor anisotropy, as given by Equation (1). The inset shows the wave-function for fixed  $L_b = 1 \text{ nm}$  and varying well width  $L_w$

that the anisotropy inversion will start to occur at a  $L_w$  smaller than that in single QWs and 2) that for  $L_b$  larger than around 1 nm, the anisotropy inversion is not expected to happen anymore. Note for example that with  $L_b = 1 \text{ nm}$ , the anisotropy instead of changing sign at  $L_w = 2 \text{ nm}$  as in the single QW case, it will change only with  $L_w$  between 1.5 and 1.45 nm. With further increase in  $L_b$  the structure is seen to present only positive anisotropies.

This can be understood by recalling that the ground state of the double QW system with a not too small  $L_b$ , has the wave-function concentrated on the QW on the right, far from the infinity barrier on the left, which is almost not seen anymore by the bound electron, which in turn is then not pushed out of the confining region to invert the anisotropy. In the upper part of Figure 2 one sees that indeed already for  $L_b = 2 \text{ nm}$ ,  $z_0$  is seen to converge to the center position of the well on the right, located in this range of  $L_w$  and  $L_b$  around 5 nm, as shown in the inset of Figure 2, where the wave-function  $\psi_0$  for different  $L_w$  and fixed  $L_b = 1 \text{ nm}$  are plotted.

The g-factor anisotropy in 2D structures has been investigated with quantum beats in time-resolved luminescence spectroscopy<sup>[3,4]</sup> or in Shubnikov-de Haas data<sup>[6]</sup> and with electron spin resonance.<sup>[13]</sup> However, besides representing sophisticated techniques, they require special conditions and samples so that, so far, only a small number of samples have been investigated, by a small number of groups. Even though the g-factor anisotropy has been clearly observed in GaAs QWs as theoretically predicted, the exact sign of the anisotropy as well as its value in structures with different compositions are not well known yet, and will require further measurements, as for the observation of the inversion point which will clearly benefit from the present results.

## 4. Conclusions

Summarizing, we have presented a theoretical study of the inversion of the g-factor anisotropy in semiconductor 2D nanostructures, and determined the critical well width for InGaAs/InP asymmetric single and double QWs. For that, the g-factor anisotropy in these structures has been calculated using 8-band kp Kane model based envelope function theory, plus first order perturbation theory to obtain the elements of the effective g-factor tensor.

A simple and useful expression for the g-factor anisotropy (Equation 1) in terms of the expectation value of the electron position and of the Rashba coupling parameter was used to calculate and understand the g-factor anisotropy inversion in these nanostructures. The g-factor anisotropy inversion is shown to occur only in asymmetric structures with very thin layers, near the transition between having and not having an allowed bound state in the structure, and corresponding to the electron being pushed out of the confining region.

For InGaAs/InP asymmetric QWs, the critical well width for the inversion is found to be  $\approx 4$  nm; and in the case of double or coupled QWs, it is found that the inversion can be expected only for very thin tunneling barriers, around 1 nm wide. These effects were shown to derive from simple properties of the structure ground state.

These results represent clear predictions bound to help the understanding, observation and use of the g-factor anisotropy-inversion effect, which is due to the Rashba SO coupling in the presence of SIA and can help the development of new semiconductor devices.

## Acknowledgments

The authors thank the Brazilian agencies CNPq, FAPESP (2016/03854-9), CAPES and FAPESB for the financial support. EAAS is thankful also to the Scuola Normale Superiore di Pisa for the kind hospitality.

## Conflict of Interest

The authors declare no conflict of interest.

## Keywords

semiconductor nanostructures, spin-orbit interaction, Zeeman effect

Received: October 31, 2018

Revised: January 2, 2019

Published online: February 14, 2019

- [1] L. M. Roth, B. Lax, S. Zwerdling, *Phys. Rev.* **1959**, *114*, 90.
- [2] E. L. Ivchenko, A. A. Kiselev, *Sov. Phys. Semicond.* **1992**, *26*, 827.
- [3] P. Le Jeune, D. Robart, X. Marie, T. Amand, M. Brosseau, J. Barrau, V. Kalevcih, *Semicond. Sci. Technol.* **1997**, *12*, 380.
- [4] A. Malinowski, R. T. Harley, *Phys. Rev. B* **2000**, *62*, 2051.
- [5] I. Žutić, J. Fabian, S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **2004**, *76*, 323.
- [6] F. Herzog, H. Hardtdegen, T. Schäpers, D. Grundler, M. A. Wilde, *New J. Phys.* **2017**, *19*, 103012.
- [7] M. A. Toloza Sandoval, A. Ferreira da Silva, E. A. de Andrade e Silva, G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **2012**, *86*, 195302.
- [8] M. A. T. Sandoval, E. A. de Andrade e Silva, A. F. da Silva, G. C. L. Rocca, *Semicond. Sci. Technol.* **2016**, *31*, 115008.
- [9] L. G. Gerchikov, A. V. Subashiev, *Sov. Phys. Semicond.* **1992**, *26*, 73.
- [10] E. A. de Andrade e Silva, G. C. La Rocca, F. Bassani, *Phys. Rev. B* **1994**, *50*, 8523.
- [11] E. de Andrade e Silva, G. La Rocca, F. Bassani, *Phys. Rev. B* **1997**, *55*, 16293.
- [12] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Monographies de physique (Les Éditions de Physique, 1988).
- [13] B. Kowalski, P. Omling, B. K. Meyer, D. M. Hofmann, C. Wetzel, V. Härlé, F. Scholz, P. Sobkowicz, *Phys. Rev. B* **1994**, *49*, 14786.

# Electronic g-tensor nanoengineering of layered semiconductor systems

J. E. Leon Padilla,<sup>1</sup> M. A. Toloza Sandoval,<sup>1</sup> and A. Ferreira da Silva<sup>1</sup>

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

A cornerstone for spintronic devices and even topological materials, the electron g-factor engineering is yet mainly based on the semiconductor bulk g-factor, which depends, in leader order, on the band-gap energy. However, in semiconductor nanostructures, the mesoscopic confinement introduces anisotropies, transforming scalar g-factors into tensors - the detailed knowledge of this renormalization mechanism represents a potential improvement to spin-engineering as addressed in this paper. Here, we theoretically investigate the different renormalization mechanisms, from bulk, interface, structure inversion asymmetry, and quantum tunneling, on the effective electronic g-factor in semiconductor multilayer structures within an analytical and accurate envelope function solution based on the Kane model for the bulk. Defining the multilayer growth direction, we consider both longitudinal and transverse magnetic fields and investigate the corresponding g-factor anisotropy over the entire space spanned by the structural parameters, including the thicknesses of active layers as well as tunneling barriers. We analyze the dependency on the bulk parameters by comparing *InAs* with *InGaAs*-based structures and explore the fine-tuning of the effective g-tensor (longitudinal and transversal g-factors) with the structural parameters. We discuss the critical regime of the strongly interacting (ultra-)thin active layers, emphasizing the structure inversion asymmetry effect that can lead to the g-factor anisotropy signal inversion near the limit for bound-states allowed, depending on the position of the center of the cyclotron motion. Consistent over the whole space of parameters, the presented framework paves a path to spin-nanoengineering, allowing for a simple calculation and transparent physical interpretation of the (obtained) nanostructure's g-factors.

Keywords: Nanotechnology — Spintronics — Semiconductors

## I. INTRODUCTION

Spintronics fast-evolved into far beyond its technological legacy already established<sup>1</sup>, becoming a fertile cross-disciplinary field of fundamental and applied research concerning utilization and understanding of the quantum spin degree of freedom of carriers in solid-state environments. As shown in a theoretical milestone, the spin degree of freedom of electrons is described according to Dirac's theory, which supports experimental pieces of evidence and establishes a unified theoretical foundation, with the relativistic quantum mechanics<sup>2</sup>. In particular, called spin *g* factor, the gyromagnetic ratio between the spin magnetic moment and the spin angular momentum has the value  $g_0 = 2$  predicted by Dirac's theory. Another correction to the magnetic moment becomes relevant for a free electron, given in terms of radiative corrections described according to quantum electrodynamics<sup>3</sup>, which predicts a free-electron *g* factor, namely  $g_e$ , such as

$$g_e = (1 + \alpha/2\pi)g_0 \approx 2.0023, \quad (1)$$

where  $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$  is the fine structure constant ( $e$  is the electron charge). Despite the approximation shown in Eq. (1), the small deviation from  $g_0 = 2$  is predicted and measured with extreme accuracy; the agreement between theoretical predictions and experiments is one of the most impressive achievements within modern sciences (as discussed in Refs.<sup>4,5</sup>, for instance). Beyond this fundamental importance, the possibility of manipulating the spin degree of freedom of carriers in solid-state environments allowed a technological breakthrough with the spintronics<sup>1,6</sup>. Among different possibilities, a fertile

route to spin-engineering in solid-state is the engineering of the electron g factor, required in fields as quantum communications<sup>7</sup> and photonics<sup>8</sup>, or even for topological material platforms<sup>9</sup>.

It is essential to note that the g factor gives the spin-splitting energy for electronic states under the presence of a magnetic field, namely Zeeman splitting. In condensed matter physics, the well-known effective mass formulation provides a theoretical framework to introduce the effective Zeeman interaction and a corresponding so-called effective g factor. Nevertheless, in condensed matter physics, the electron g-factor is strongly renormalized from the free-electron g-factor  $g_e$ . In semiconductors, for example, the g-factor is renormalized by bandstructure effect and varies from  $\sim 2$  in GaN to  $\sim -50$  in InSb. Such variation depends on leader order on the bandgap energy of the bulk semiconductor and is well described by the Roth prescription<sup>10</sup> as follows:

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

$m^*/m_e$  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. Narrow-gap semiconductors are widely used in emergent technologies, like optoelectronics and spintronics. Such materials are particularly promising for applications in electron g-factor engineering, in view of the strong dependence of the effective g-value on the fundamental gap. The so-called Landé g-factor is a fundamental parameter that determines the spin splitting of the electronic energy in response to an external magnetic field.

TABLE I. Alloys used and the corresponding bulk band parameters (see Refs.<sup>7,11?</sup>,<sup>12</sup>).

	InAs	In <sub>0.53</sub> Ga <sub>0.47</sub> As	InP	AlSb
$E_g$	0.42	0.81	1.42	2.38
$\Delta$	0.38	0.33	0.11	0.67
$m^*$	0.023	0.041	0.079	0.13
$g^*$	-14.9	-4.5	+1.26	+0.84

## II. LAYERED SEMICONDUCTOR SYSTEMS

Considering narrow-gap 2D heterostructure, of the nine independent elements of  $g^*$  only two are non zero in first order<sup>13</sup>:  $g_{\parallel}$  and  $g_{\perp}$ , diagonal elements corresponding to magnetic fields parallel and perpendicular to the interfaces. Breaking of translation symmetry along the QW growth direction ( $\hat{z}$ , for example), the leading order electron g-factor tensor can be written as

In semiconductor quantum wells with dominating Rashba spin-orbit coupling, i.e., where the Dresselhaus contribution can be neglected, of the nine independent elements of  $g^*$  only two are non zero in first order:  $g_{\parallel}$  and  $g_{\perp}$ , corresponding to magnetic fields parallel and perpendicular to the interfaces, respectively. Flat band heterostructures form a special case, providing a clear Even for 2D structures with band profiles far from flat, there is always the  $\alpha_R \neq 0$  contribution at the interfaces, the only one for flat-bands and often the dominant one. Since the bulk average is independent of the field and/or growth orientation,  $\Delta g^{2D}$  is identified as the g-factor anisotropy because, in the same order of approximation, one finds  $g_{\perp} = \langle g_{bulk} \rangle_{\psi_0}$ . Taking to the growth direction along the  $z$  axis, the leading order electron g-factor tensor can be written as For the magnetic field along the growth direction,

$$g_{\parallel} = 2 - \left\langle \frac{m_0}{m_i(\varepsilon_0)} \frac{2\Delta^{(i)}}{3\varepsilon_g^{(i)}(\varepsilon_0) + 2\Delta^{(i)}} + \delta g_r^{(i)} + \frac{4m_0}{\hbar^2} \alpha_R(z, \varepsilon_0) (z - z_0) \right\rangle_{\psi_0} \quad (3)$$

The known bulk formula is recovered in limits of  $L_w \rightarrow 0$  and of sufficiently large  $L_w$ , when  $\varepsilon_g^b(\varepsilon_0) \rightarrow E_g^b$  (with  $P_w = 0$  and  $P_b = 1$ ) and  $\varepsilon_g^w(\varepsilon_0) \rightarrow E_g^w$  (with  $P_w = 1$  and  $P_b = 0$ ) respectively (note that the energy dependent effective mass also goes to the bulk band-edge effective mass, i.e. in these bulk limits one has respectively  $m_b(\varepsilon_0) = m_b^*$  and  $m_w(\varepsilon_0) = m_w^*$ ), this formula generalizes that of Roth et al. for the bulk<sup>7</sup> and is part of our analytical solution for the g-factor renormalization in 2D structures.

In a more usual form, the averaged  $g_{bulk}$  can be written in terms of the main parameters as:

$$g_{\perp} = 2 - \left\langle \frac{m_0}{m_i(\varepsilon_0)} \frac{2\Delta^{(i)}}{3\varepsilon_g^{(i)}(\varepsilon_0) + 2\Delta^{(i)}} + \delta g_r^{(i)} \right\rangle_{\psi_0} \quad (4)$$

where  $\mathcal{P}_i$  is the probability to find the electron in the layers  $i$  (well or barrier); note that it is an expectation value of the bulk g factor calculated however with an (energy dependent) effective gap  $\varepsilon_g^{(i)}(\varepsilon_0)$  ( $= \varepsilon_0 - E_c^{(i)} + E_g^{(i)}$ ), also note that  $z_0$  is the position of the center of cyclotron orbit,  $\varepsilon_0$  and  $\psi_0$  are the zero order solutions (for the effective mass equation) and  $\alpha_R$  is the Rashba coupling parameter<sup>14?</sup>,<sup>15</sup>.

$$\alpha_R(z, \varepsilon) = \frac{P^2}{2} \frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{\varepsilon - E_c + E_g} - \frac{1}{\varepsilon - E_c + E_g + \Delta} \right]. \quad (5)$$

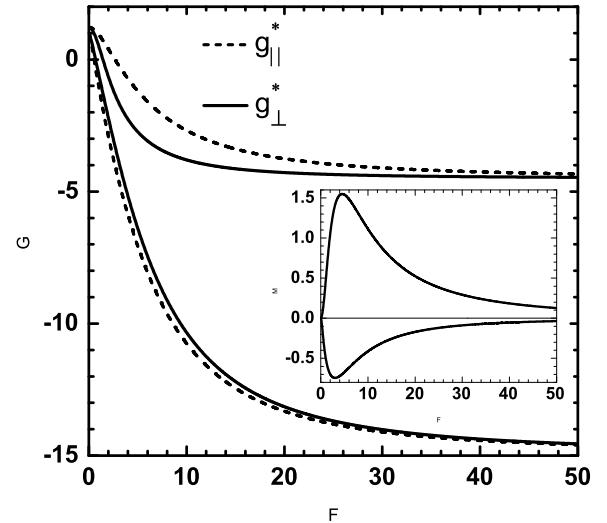
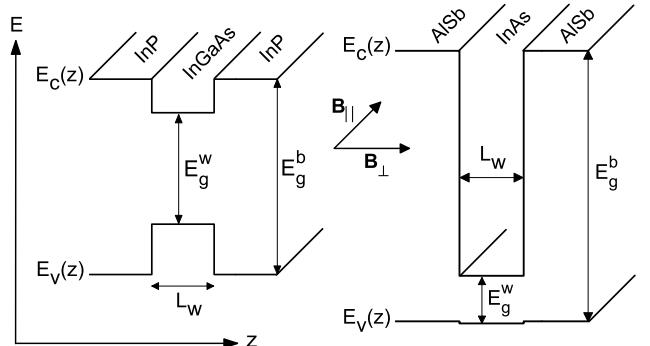


FIG. 1.

As a most general example, we consider a asymmetric multilayer (*Insulator/CdTe/InSb/CdTe/InSb* structure), which depend on set of parameters given by the width of the *InSb* and (middle) *CdTe* layers,  $L_w$  and  $L_b$ , plus their bulk band parameters and band offset. For each point in the space spanned by the two varying parameters,  $L_w$  and  $L_b$ , we solve the unperturbed problem (to obtain  $\psi_0$  and  $\varepsilon_0$ ) and calculate  $z_0 = \langle z \rangle_{\psi_0}$  and the probabilities  $P_i = \int_i |\psi_0|^2 dz$ ; then we use these expressions to solve the Eqs. ?? and ???. In flat-band structures, the expectation value in Eq. ?? is straightforwardly com-

puted and  $\Delta g^{2D}$  is seen to be given in terms of the density of probability  $\mathcal{P}$  ( $= |\psi_0|^2$ ) at the different interfaces. Taking the z-origin at the leftmost infinite barrier with  $|\psi_0(z=0)|^2 = 0$  (see Fig.3), three non-equivalent interfaces contribute (at  $z = L_w, L_w + L_b, 2L_w + L_b$ ), and numbering them from the left one gets:

$$\Delta g_{2D}^* = (4m_0/\hbar^2) \left[ (\mathcal{P}_3 - \mathcal{P}_2 + \mathcal{P}_1)(L_w - z_0) + (\mathcal{P}_3 - \mathcal{P}_2)L_b + \mathcal{P}_3L_w \right] \delta\beta. \quad (6)$$

These expressions complete the analytical solution and make clear each feature of the Figure 1, with a look at the corresponding  $\psi_0$ , as well as at the individual elements  $g_\perp$  and  $g_\parallel$ . See for instance the results in Figures 2 and 3 for  $L_w = 2 \text{ nm}$  ADQWs with varying  $L_b$  in a fine grid ( $0.2 \text{ nm}$ ), where (a) shows  $\psi_0(z)$ , (b)  $g_\perp$ , (c)  $g_\parallel$  and (d)  $\Delta g$ , and the insets give examples of the three different interacting regimes, i.e. the non-interacting single QW, in the limits of  $L_b = 0$  and  $L_b \gg L_w$ , and the coupled regime in between. Note that in ADQWs,  $|\psi_0|^2$  is always concentrated in only one layer (that on the right, far from the large barrier on the left). To this corresponds an important qualitative difference also in  $z_0$  as a function of  $L_w$  and  $L_b$ ; while it is always zero in symmetric QWs, in ADQWs instead, it does vary significantly and is responsible for the negative anisotropies in very thin layer structures. In such thin layer limit,  $\psi_0$  describes states with energy close to the top of the *InP* barrier, near the region with no allowed bound states, and feels strongly the asymmetry of the confining potential. For this reason the symmetric QW and asymmetric QW results in this regime present larger contrast, and the ADQW  $z_0$  is pushed away from the larger barrier, leading to the negative anisotropies. Figure 1 shows the obtained anisotropy showing rich qualitative differences, particularly in the strong coupling regime at the small  $L_b$  region. The large negative anisotropies (down to  $\Delta g = -2.4$ ) seen in the small area at the lower left angle of the map, corresponding to thin layer structures, just on the right of the black area, which is the region of the asymmetric structures with no allowed bound states.

In order to shine some light to this problem and also to understand the possible implications of the tunnel coupling in the more general double well structures (DQWs) illustrated in Figure 1, we calculate the effective g factor for electrons in these DQWs and investigate its anisotropy as a function of the well width  $L_w$  and the inter-well barrier width  $L_b$ .

Summarizing, we have investigated the effective g factor for electrons in semiconductor DQWs and presented specific results for the g-factor anisotropy in Al-GaAs/GaAs DQWs. New and different variations for the g-factor anisotropy as a function of both barrier and well width are obtained which describe effects of the quantum tunneling in the electron g-factor engineering, which in turn is fundamental to the development of spintronic applications.

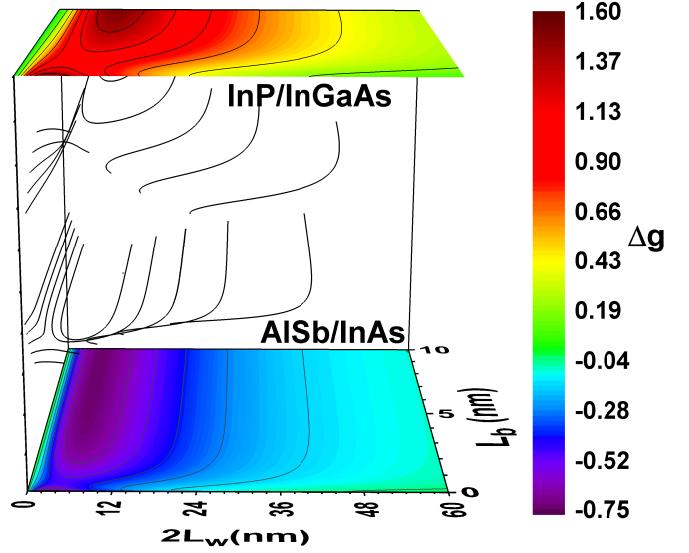


FIG. 2.

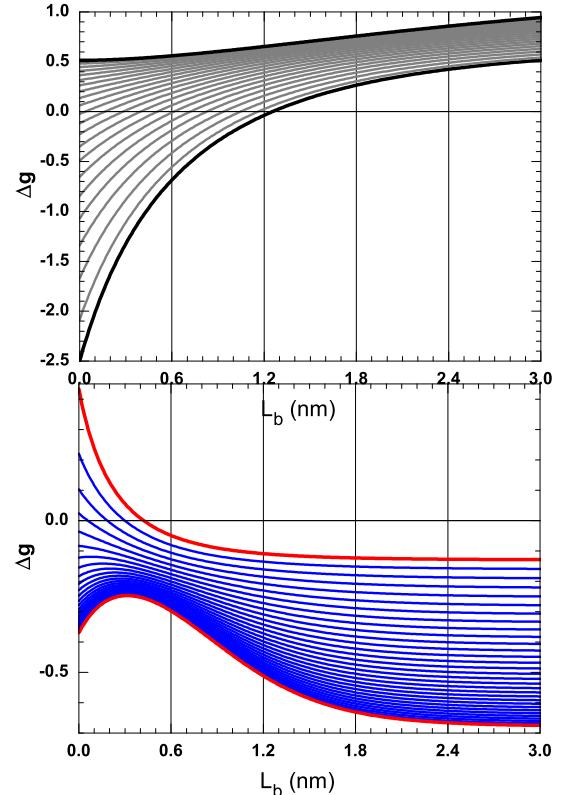


FIG. 3.

### III. ACKNOWLEDGEMENTS

This work is partially supported by the Office of Naval Research (Global office in South America, NICOP) Grant No.N62909-18-1-2121, FAPESP Grant No. 2014/03085-0, CAPES (No. PNPD 88882.306206/2018- 01), CNPq

Grant No.306145/2018-9, FAPESB Grants No. PNX 0007/2011 and INT 0003/2015.

- <sup>1</sup>A. Fert, “Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics,” Rev. Mod. Phys. **80**, 1517–1530 (2008).
- <sup>2</sup>S. Tomonaga, *The Story of Spin* (University of Chicago Press, 1997).
- <sup>3</sup>J. Schwinger, “On quantum-electrodynamics and the magnetic moment of the electron,” Phys. Rev. **73**, 416 (1948).
- <sup>4</sup>M. Peskin and D. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory* (Addison-Wesley Publishing Company, 1995).
- <sup>5</sup>M. Maggiore, *A Modern Introduction to Quantum Field Theory* (Oxford University Press, 2005).
- <sup>6</sup>I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, “Spintronics: Fundamentals and applications,” Rev. Mod. Phys. **76**, 323–410 (2004).
- <sup>7</sup>H. Kosaka, A. Kiselev, F. Baron, K. Wook Kim, and E. Yablonovitch, “Electron g factor engineering in iii-v semiconductors for quantum communications,” Electronic Letters **37**, 464–465 (2001).
- <sup>8</sup>S. Datta and B. Das, “Electronic analog of the electro-optic modulator,” Appl. Phys. Lett. **56**, 665–667 (1990).
- <sup>9</sup>R. M. Lutchyn, E. P. A. M. Bakkers, L. P. Kouwenhoven, P. Krogstrup, C. M. Marcus, and Y. Oreg, “Majorana zero modes in superconductorsemiconductor heterostructures,” Nat. Rev. Mater. **3**, 52–68 (2018).
- <sup>10</sup>L. M. Roth, B. Lax, and S. Zwerdling, “Theory of optical magneto-absorption effects in semiconductors,” Physical Review **114**, 90 (1959).
- <sup>11</sup>“Semiconductors: Intrinsic properties of group iv elements and iii-v, ii-vi and i-vii compounds,” in *Landolt-Bornstein New Series*, Vol. III/22a, edited by O. Madelung (Springer, Berlin, 1987).
- <sup>12</sup>J.-M. Jancu, R. Scholz, E. A. de Andrade e Silva, and G. C. La Rocca, “Atomistic spin-orbit coupling and  $k^2\mathbf{p}$  parameters in iii-v semiconductors,” Phys. Rev. B **72**, 193201 (2005).
- <sup>13</sup>Considering structures with dominating Rashba spin-orbit coupling, where the Dresselhaus contribution can be neglected.
- <sup>14</sup>E. A. de Andrade e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani, “Spin-split subbands and magneto-oscillations in iii-v asymmetric heterostructures,” Phys. Rev. B **50**, 8523–8533 (1994).
- <sup>15</sup>E. A. de Andrade e Silva, G. L. Rocca, and F. Bassani, “Spin-orbit splitting of electronic states in semiconductor asymmetric quantum wells,” Physical Review B **55**, 16293–16299 (1997).

