

Universidade Federal Fluminense
Pós-graduação

Um polarizador de spin de dupla barreira

Dissertação para obtenção
do título de mestre em Física

Aluno: Carlos Ferreira Ritter
Orientador: Sergio Saul Makler

30 de Agosto de 2006

Dedicatória

à minha família.

Agradecimentos

- Aos meus pais, Madeleine e José Carlos, pelo amor e pelo carinho;
- À minha irmã Aline, pela amizade e pelo companheirismo;
- Ao meu orientador, professor Sergio Saul Makler, pelo grande incentivo, por todos os ensinamentos desde o primeiro período da graduação e pela satisfação de podermos trabalhar juntos;
- À minha amiga Liliane, pelo apoio e pela paz de espírito;
- Ao meu amigo Dermeval, pelo apoio e carinho e pelos ensinamentos;
- A todos os amigos da faculdade que tornaram a minha vida universitária mais prazerosa;
- A todos os professores com os quais convivi na UFF e que foram muito importantes para minha formação;
- Aos funcionários da UFF que me ajudaram sempre que precisei.

Resumo

Esta dissertação trata de um modelo teórico de um dispositivo nanoscópico baseado em estudos sobre semicondutores magnéticos diluídos (DMS) e transporte em heteroestruturas semicondutoras com o objetivo de contribuir para o desenvolvimento da spintrônica. Esta por sua vez, propõe a exploração do grau de liberdade de spin das partículas além da carga delas. Este ramo da física tem recebido bastante atenção, pois pode servir futuramente como base para a computação quântica. O dispositivo consiste de heteroestruturas semicondutoras formadas por camadas de $Mn_xGa_{1-x}As$ e $Al_yGa_{1-y}As$. O $Mn_xGa_{1-x}As$, a baixas temperaturas e para certos valores de x , é um semicondutor ferromagnético. Foi realizado um estudo do tunelamento ressonante em dupla barreira para buracos pesados (HH) e buracos leves (LH). Os cálculos foram feitos em uma aproximação “tight-binding” e foi utilizada a aproximação Hartree para a interação entre buracos. Foi empregado um método de dizimação para o tratamento da equação de Schrödinger na direção perpendicular às interfaces do material, e foram calculados a distribuição de cargas e o perfil de energia potencial de forma autoconsistente. Analisamos a corrente de buracos e os níveis ressonantes do poço formado pela dupla barreira sendo o dispositivo submetido a uma diferença de potencial variável sem a aplicação de um campo magnético externo. Dentro deste modelo, observamos que a distribuição de cargas positivas é essencialmente de HH e o magnetismo é sustentado também pelos HH. Além disto, a partir do estudo das evoluções da distribuição de cargas e do perfil de potencial sob uma voltagem variável, pudemos desenvolver métodos numéricos bem otimizados. Observamos também a existência de dois regimes distintos para a evolução do perfil de energia potencial. Por fim, obtivemos correntes polarizadas por spin para os LH.

Abstract

In this thesis it is developed a theoretical model for a nanoscopic device based on studies of diluted magnetic semiconductors (DMS) and transport in semiconducting heterostructures. The main motivation for working with this project is to make a contribution for the development of spintronics which has the purpose of exploiting spin degrees of freedom of particles as well as their charges. This area of physics has received much attention because it can be a basis for quantum computing in the future. The device consists of semiconducting heterostructures made from layers of $Mn_xGa_{1-x}As$ and $Al_yGa_{1-y}As$. $Mn_xGa_{1-x}As$ is, at low temperatures and for some values of x , a ferromagnetic semiconductor. It was made a study of double barrier resonant tunneling for heavy holes (HH) and light holes (LH). The calculations were made in the tight-binding approximation and the interaction between holes was calculated in the Hartree approximation. It was used a decimation formalism for the treatment of the spatial component of the Schrödinger equation perpendicular to the material interfaces. Furthermore, charge distribution and potential energy profile were calculated selfconsistently. We have analyzed the current of holes and the resonant levels of the well (created by the double barrier) for the device, under a variable applied voltage and without external magnetic field. In the proposed model, we have observed that hole distribution is essentially made of HH and the magnetism is also sustained by HH. Furthermore, from the study of how charge distribution and potential profile evolve under an variabel applied voltage, we could develop well optimized numerical methods. We have also observed the existance of two distinct regimes for the evolution of the potencial energy profile. At last, we obtained spin polarized currents for LH.

Conteúdo

Dedicatória	i
Agradecimentos	iii
Resumo	v
Abstract	vii
Conteúdo	ix
Lista de figuras	xi
1 Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.2 Objetivo	1
1.3 O dispositivo	2
1.4 O hamiltoniano	5
1.5 Transporte quântico e o tunelamento ressonante	7
1.5.1 Coeficientes de Fresnel e Transmitância	8
2 Corrente	11
2.1 Equação de continuidade	11
2.2 Corrente de um portador	13
2.3 Corrente total	14
3 Tratamento de um sistema aberto	19
3.1 Equação de Schrödinger matricial	19
3.2 Desacoplamento do sistema	22
3.2.1 O emissor e o coletor	24
3.2.2 A região de espalhamento e suas fronteiras	24
3.3 Dizimação das soluções de $\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}$ e o reacoplamento	27
4 Solução autoconsistente	29
4.1 A distribuição de cargas	29
4.1.1 Ocupação do sistema	30
4.2 Energia potencial do sistema	35
4.2.1 Método de cálculo da energia potencial	36
4.2.2 Solução particular da equação de Poisson	37

4.2.3	Solução homogênea da equação de Poisson	39
5	Resultados e conclusões	43
5.1	Distribuição de cargas e perfil de energia potencial	43
5.1.1	Distribuição de cargas	43
5.1.2	Perfil de energia potencial	44
5.2	Correntes polarizadas por spin	51
5.3	Conclusões	54
A	Relações de dispersão	59
B	Normalização da função de onda	65
	Bibliografia	71

Lista de Figuras

1.1	O material que forma a dupla barreira de energia potencial na ausência de dopagem.	4
1.2	A dupla barreira de energia potencial para os buracos.	5
2.1	Diagrama que descreve a corrente entre os planos.	13
2.2	Semi-esfera de Fermi.	16
3.1	Representação do sistema cortado.	22
3.2	Poço infinito artificial que inclui a dupla barreira (perfil de $\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}$).	25
3.3	Reacoplamento das três regiões do sistema.	27
3.4	Sistema renormalizado após dizimação das soluções de $\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}$	28
4.1	Energia cinética do sistema em que cada parabolóide representa uma banda de energia associada a um nível do poço.	31
4.2	Densidade de estados total.	32
4.3	Número de estados total.	34
4.4	Perfil de energia potencial para $V = 0$ mV. Este diagrama mostra os setores $l = 1, 2, 3$ da região de espalhamento. O setor $l = 2$ contém toda a distribuição de cargas positivas geradas pela dopagem de Mn . Os pontos j_1 e j_2 representam respectivamente o último plano da região 1 e o primeiro plano da região 3.	37
4.5	A função de Green G_{ij} para um i fixo.	38
5.1	Distribuição de cargas para $V = 0$ mV.	44
5.2	Distribuição de cargas para $V = 92$ mV.	45
5.3	$\Delta\sigma(z)$ para $V = 92$ mV.	45
5.4	Distribuição de cargas em termos de massa efetiva para $V = 0$ mV.	46
5.5	Distribuição de cargas em termos de spin para $V = 0$ mV.	46
5.6	O perfil de energia potencial com os níveis de energia da região de espalhamento para $V = 0$ mV.	48
5.7	O perfil de energia potencial para $V = 92$ mV.	50
5.8	$\Delta U(z)$ para $V = 92$ mV em uma dupla barreira com largura do poço igual a 93 Å e largura das barreiras igual a 40 Å.	51

5.9	$\Delta U(z)$ para $V = 0,1$ mV em uma dupla barreira com largura do poço igual a 100 \AA e largura das barreiras igual a 20 \AA	52
5.10	Corrente de buracos gerada por uma voltagem variável. Vemos correntes de LH polarizadas por spin. Além disto, verificamos que as correntes de HH são desprezíveis em comparação as correntes de LH.	53
5.11	Um pico de transmitância de HH para $V = 0$ mV.	54
5.12	Um pico de transmitância de LH para $V = 0$ mV. Podemos ver a diferença de escala deste gráfico em relação ao da figura 5.11. Ao comparar o pico de transmitância de um HH com o pico de um LH, concluímos que a razão entre as larguras destes picos é $0,8 \times 10^{-5}$	55
5.13	Logarítimo da transmitância em função da energia dos buracos, para $V = 0$ mV. São considerados os quatro tipos de portadores do nosso sistema.	56
B.1	Relação de dispersão no emissor.	68

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

O conjunto de avanços realizados no estudo de semicondutores magnéticos diluídos (DMS) nos últimos anos, sejam eles no campo experimental ou teórico, é uma grande motivação para a realização deste projeto. Particularmente, a descoberta de ferromagnetismo em DMS baseados em compostos III-V, como $Mn_xGa_{1-x}As$ e $Mn_xIn_{1-x}As$ [1, 2], tem estimulado muitos trabalhos na área da spintrônica, propondo novos dispositivos [3, 4, 5, 6, 7, 8] e desenvolvendo teorias que melhorem a nossa compreensão dos fenômenos relacionados a estes materiais [9]. A spintrônica [10, 11, 12, 13] propõe a exploração do grau de liberdade de spin das partículas, diferentemente da eletrônica tradicional na qual é apenas explorada a carga delas. Outra grande motivação para a realização deste projeto é que o desenvolvimento da spintrônica pode ser um dos caminhos para a construção do computador quântico [13]. Um aspecto importante do desenvolvimento de dispositivos spintrônicos semicondutores é que estes podem em princípio gerar amplificação de sinais, diferentemente de dispositivos baseados em metais. Outro aspecto é que seria bem mais fácil integrar dispositivos semicondutores à já existente tecnologia eletrônica de semicondutores [13]. Além disso, foi também estimulada a criação de novas técnicas de crescimento de materiais, as quais produzem as heteroestruturas necessárias para a fabricação de dispositivos e aplicações tecnológicas.

1.2 Objetivo

Propomos neste projeto um modelo para um diodo de tunelamento ressonante, que deve gerar correntes de buracos polarizadas por de spin. Este dispositivo também pode funcionar como um analisador de correntes de spin. A geração de portadores polarizados por spin [3, 7, 14] é um problema muito estudado ultimamente, tendo em vista, não

somente os avanços da spintrônica, mas também a possibilidade da computação quântica. Quando submetido a uma voltagem V variável, o dispositivo produzirá uma corrente de portadores polarizada por spin dependente de V sem a aplicação de um campo magnético externo. No trabalho aqui apresentado, os estudos foram restritos a correntes de buracos (portadores com carga positiva), pois estes são os portadores majoritários no material utilizado como base para os cálculos. O modelo foi baseado em uma dupla barreira com poço semimagnético formada por heteroestruturas semicondutoras. Os cálculos deste modelo foram realizados na aproximação “tight-binding”, parte analiticamente e parte numericamente. A distribuição de cargas, o potencial e as funções de onda dos portadores no sistema aqui tratado foram definidos como funções discretizadas cujas componentes são os valores destas grandezas em sítios alocados nos átomos da rede cristalina. Foi feito um tratamento da equação de Schrödinger no espaço real, usando um método de dizimação [15, 16]. Este me permite desacoplar o cálculo das funções de onda na região de espalhamento (região com perfil de energia potencial não uniforme) e fora dela, tratá-las separadamente e reacoplá-las de forma exata. Neste processo são dizimadas as soluções da região de espalhamento de forma a obter as soluções do emissor em função das soluções do coletor. Aliado a isso foi utilizado um processo autoconsistente para a obtenção da distribuição de cargas e o perfil de potencial. Aqui foram considerados buracos leves (LH) assim como buracos pesados (HH). Utilizarei a letra α como índice para expressar a massa efetiva dos buracos nas equações, $\alpha = l$ para LH e $\alpha = h$ para HH. Apesar da diferença entre as massas efetivas ser grande, para a faixa de energia dos níveis estudados e para os valores de V aplicada ao sistema, ambos os níveis de LH e HH da dupla barreira são importantes para os cálculos realizados neste projeto [14, 17, 18, 19]. É importante também ressaltar que um grande esforço foi dedicado para, além de obter resultados que nos proporcionem um enriquecimento da compreensão do dispositivo proposto, utilizar esses resultados a fim de desenvolver e aplicar métodos computacionais de forma a criar um programa eficiente.

1.3 O dispositivo

Primeiramente, foi abordada a construção de uma dupla barreira de energia potencial que é o principal elemento do nosso projeto. Esta dupla barreira consiste de heteroestruturas (estruturas formadas pela junção de camadas de materiais diferentes) formadas por um emissor de $GaAs$, uma barreira de $AlAs$ com 40 Å de espessura, um poço de $Mn_xGa_{1-x}As$ com 93 Å de espessura, outra barreira de $AlAs$ com 40 Å de espessura e um coletor de $AlAs$ com 40 Å de espessura. Os parâmetros de rede do $GaAs$ e do $AlAs$ são 5,653 Å e 5,660 Å, respectivamente. Estes materiais têm ambos a estrutura Zinc Blende de forma que a distância entre duas bicamadas (uma bicamada consiste de um plano de As e o plano de Ga ou Al mais próximo da estrutura cristalina) é, para os dois materiais, aproximadamente 2,828 Å (metade do parâmetro de rede). Não considerarei

para o *GaAs* puro e o dopado com *Mn* diferenças entre parâmetros de rede e valores de massa efetiva para os portadores destes materiais.

Estes dois materiais têm diferentes “gaps” de energia entre a banda de condução e a banda de valência [20, 21]. O “gap” do *GaAs* é menor que o “gap” do *AlAs* de forma que há a formação de dupla barreira nas bandas de energia dessas heteroestruturas. A região interna da dupla barreira, ou seja, a camada central é formada por *GaAs* dopado com Mn^{2+} que substituem principalmente os íons Ga^{3+} da rede [22]. A dopagem que ocorre neste material é positiva, pois os íons Mn^{2+} , que substituem os íons Ga^{3+} , atuam como impurezas aceitadoras de elétrons (cada Mn^{2+} substitucional aceita um elétron extra ficando carregado negativamente) gerando uma quantidade de buracos. Portanto, chamarei as impurezas ionizadas de Mn^- . No nosso caso, o grau de dopagem é tal que as densidades de buracos livres e de impurezas carregadas negativamente são de 10^{20} cm^{-3} . Desta forma, dentro do poço há uma liga de $Mn_xGa_{1-x}As$. O valor de x representa a fração de átomos de *Ga* da rede que foram substituídos por impurezas. Para pequenas concentrações de *Mn*, esta liga é um isolante paramagnético. Conforme x aumenta, o material se torna ferromagnético e para concentrações maiores ($x \approx 0,03$) a liga passa por uma transição isolante-metal permanecendo na fase ferromagnética. Para $x > 0,05$, a liga se torna um isolante ferromagnético. Na fase metálica, a transição ferromagnética ocorre na faixa de temperatura de 30 – 110 K, dependendo do valor de x . Foi reportada uma temperatura de Curie $T_C \approx 140$ K obtida por recozimento da amostra com monitoramento da resistividade [23]. Além disso, em dispositivos baseados em *GaAs* com dopagem p seletiva de *Mn* foi reportado o controle elétrico externo da concentração de buracos livres e da T_C [24], assim como uma temperatura de Curie $T_C \approx 172$ K. Estas temperaturas ainda são muito baixas para aplicações tecnológicas, porém foram reportadas temperaturas de Curie acima da temperatura ambiente em filmes de *ZnO* dopados com *Co* [25, 26], e em filmes de *GaN* com dopagem n de *Mn* [27]. Amostras homogêneas de ligas de $Mn_xGa_{1-x}As$ com x até 7% foram produzidas por epitaxia de feixe molecular de baixa temperatura (LT-MBE) sem a formação de “clusters” que poderiam fazer o material se tornar não-magnético [1, 28]. A figura 1.1 contém uma representação simplificada e fora de proporção das bandas de valência e condução do material utilizado neste trabalho, mostrando as diferenças entre as bandas no material e a formação da dupla barreira (não foi considerada nesta figura dopagem de *Mn* na camada central de *GaAs*).

No $Mn_xGa_{1-x}As$, o ferromagnetismo é mediado pelos buracos [28, 29, 30, 32]. A interação entre os buracos e os átomos de Mn^- é antiferromagnética de forma que é induzida uma interação ferromagnética indireta entre os íons de Mn^- , ficando estes com seus spins alinhados na mesma direção. Definirei esta direção como up. Ainda está em debate na literatura se neste material os buracos que mediam a interação ferromagnética são localizados ou não. No caso de se considerar os buracos deslocalizados ou pouco localizados o ferromagnetismo pode ser descrito como uma interação RKKY [28, 30, 31]. Se, ao contrário, os buracos forem considerados localizados próximos aos sítios de dopagem,

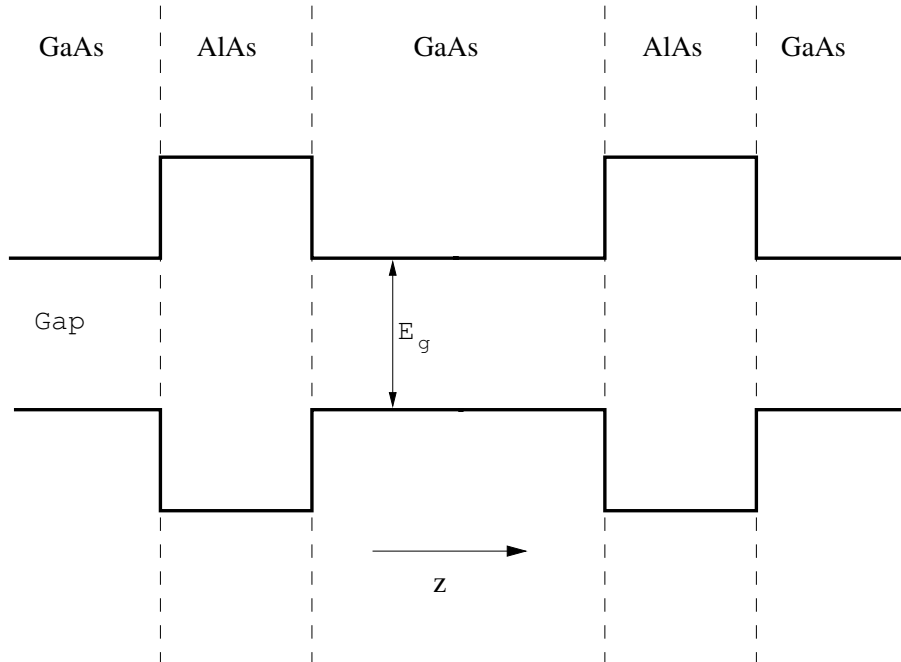


Figura 1.1: O material que forma a dupla barreira de energia potencial na ausência de dopagem.

o ferromagnetismo deve ser descrito por outro tipo de interação indireta [32]. Farei aqui um estudo de transporte de spin de buracos. Portanto, devo analisar este fenômeno na banda de valência do material. Devido à presença de ferromagnetismo na região interna da dupla barreira, há um deslocamento do topo da banda de valência do $Mn_xGa_{1-x}As$, sendo este deslocamento oposto para buracos com spin down em relação a buracos com spin up (representarei o sinal do spin pela letra σ). O “splitting” espontâneo (sem campo magnético) da banda de valência já foi observado na característica corrente-voltagem em experimentos feitos com dispositivos que usam $Mn_xGa_{1-x}As$ como um emissor [3, 14]. Defino, para realização dos cálculos, o eixo z do meu sistema cartesiano de coordenadas paralelo à direção de crescimento das heteroestruturas. Esta é a direção na qual faço o estudo de transporte, ou seja, a energia potencial do meu sistema depende apenas da variável z . Então, terei sítios definidos na direção do eixo z aos quais estão associados planos paralelos ao plano xy (cada plano está representado por um índice j). Posso representar, de forma simples, uma dupla barreira na perspectiva dos buracos equivalente àquela formada na banda de condução. Podemos ver esta representação na figura 1.2. O valor deste fator de deslocamento mencionado anteriormente foi obtido de um cálculo realizado por Ghazali *et al* [33], em estudos de poços quânticos, e foi utilizado em outros trabalhos de sistemas de multicamadas [34]. Neste cálculo, é obtido um acréscimo de 75 meV para buracos com spin up ($\sigma = +1$) e um decréscimo de mesma magnitude para buracos com spin down ($\sigma = -1$). Cada barreira tem 40 Å de largura o que corresponde

à 14 bicamadas de *AlAs*. As barreiras têm altura de 529 meV, que é devida à diferença de energia entre as bandas de valência do *GaAs* e do *AlAs*. O poço tem 93 Å de largura o que corresponde à 33 bicamadas e sua base está a +75 meV ou -75 meV, dependendo se os portadores têm spin up ou down respectivamente.

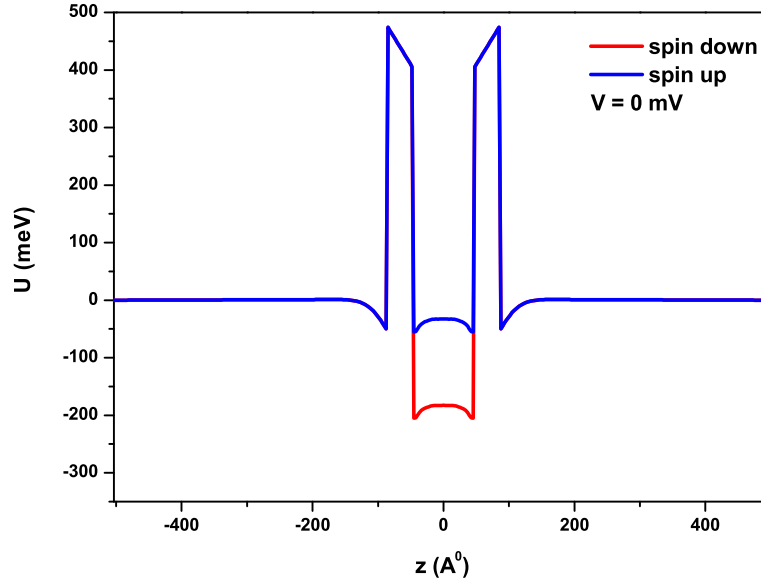


Figura 1.2: A dupla barreira de energia potencial para os buracos.

1.4 O hamiltoniano

Os spins dos portadores são tratados dentro do modelo de dois canais de spin, no qual portadores com spin paralelo e antiparalelo são tratados independentemente, pois efeitos como “spin-flip” podem ser negligenciados para a escala de tamanho do material e a escala de tempo considerados aqui. Cada spin está submetido a um perfil diferente de energia potencial, pois esta depende de σ devido ao “spin-splitting” que ocorre na banda de valência da região dopada com Mn^- . Além disso, a energia cinética dos buracos depende da massa efetiva dos mesmos, indicada por α . Também devo ressaltar que o nosso modelo trata a interação entre portadores na aproximação de Hartree.

Como consequência da aproximação de Hartree, no nosso caso, o hamiltoniano do sistema completo é escrito como um somatório sobre $i(\alpha\sigma)$:

$$\mathcal{H} = \sum_{i(\sigma\alpha)}^{N^H} \mathcal{H}^{i(\sigma\alpha)} \quad (1.1)$$

no qual $\mathcal{H}^{i(\sigma\alpha)}$ é o hamiltoniano da partícula i cujo spin é indicado por σ e cuja massa efetiva é indicada por α . Escreverei a função de onda completa como um produtório das funções de onda de cada partícula:

$$\Psi = \prod_{i(\sigma\alpha)}^{N^H} \Psi^{i(\sigma\alpha)} \quad (1.2)$$

onde $\Psi^{i(\sigma\alpha)}$ é a função de onda da partícula i . Além disto,

$$N^H = N_{1H}^H + N_{1L}^H + N_{1H}^H + N_{1L}^H \quad (1.3)$$

onde N^H , N_{1H}^H , N_{1L}^H , N_{1H}^H e N_{1L}^H são o número total de buracos, o número de HH com spin down, o número de LH com spin down, o número de HH com spin up e o número de LH com spin up respectivamente. A equação de autovalores com o hamiltoniano e a função de onda completos é

$$\mathcal{H}\Psi = \mathcal{E}\Psi \quad (1.4)$$

ou

$$\left(\sum_{j(\sigma'\alpha')} \mathcal{H}^{j(\sigma'\alpha')} \right) \left(\prod_{i(\sigma\alpha)} \Psi^{i(\sigma\alpha)} \right) = \mathcal{E} \left(\prod_{i(\sigma\alpha)} \Psi^{i(\sigma\alpha)} \right). \quad (1.5)$$

Como $\mathcal{H}^{i(\sigma\alpha)}$ age apenas em $\Psi^{i(\sigma\alpha)}$ posso escrever

$$\sum_{i(\sigma\alpha)} \left(\prod_{j(\sigma'\alpha')}^{(i)} \Psi^{j(\sigma'\alpha')} \right) \mathcal{H}^{i(\sigma\alpha)} \Psi^{i(\sigma\alpha)} = \mathcal{E} \left(\prod_{i(\sigma\alpha)} \Psi^{i(\sigma\alpha)} \right) \quad (1.6)$$

na qual o índice superior (i) , no produtório que está no membro esquerdo, indica que o produto é para $j = 1, \dots, N^H$, exceto $j = i$. Ao dividir ambos os membros da equação (1.6) por $\prod_{i(\sigma\alpha)} \Psi^{i(\sigma\alpha)}$ obtenho

$$\sum_{i(\sigma\alpha)} \frac{1}{\Psi^{i(\sigma\alpha)}} \mathcal{H}^{i(\sigma\alpha)} \Psi^{i(\sigma\alpha)} = \mathcal{E}. \quad (1.7)$$

Como \mathcal{E} é uma constante, cada termo somado no lado esquerdo do sinal de igual de (1.7) também é uma constante, ou seja,

$$\frac{1}{\Psi^{i(\sigma\alpha)}} \mathcal{H}^{i(\sigma\alpha)} \Psi^{i(\sigma\alpha)} = \mathcal{E}^{i(\sigma\alpha)} \quad (1.8)$$

e

$$\sum_{i(\sigma\alpha)} \mathcal{E}^{i(\sigma\alpha)} = \mathcal{E}. \quad (1.9)$$

Assim, obtenho para cada partícula uma equação de autovalores:

$$\mathcal{H}^{i(\sigma\alpha)} \Psi^{i(\sigma\alpha)} = \mathcal{E}^{i(\sigma\alpha)} \Psi^{i(\sigma\alpha)}. \quad (1.10)$$

Como cada uma destas equações pode ser resolvida independentemente das outras, a partir deste ponto omitirei os índices i do $\mathcal{H}^{i(\sigma\alpha)}$, da $\Psi^{i(\sigma\alpha)}$ e da $\mathcal{E}^{i(\sigma\alpha)}$ e os escreverei como $\mathcal{H}^{\sigma\alpha}$, $\Psi^{\sigma\alpha}$ e $\mathcal{E}^{\sigma\alpha}$.

Nos planos perpendiculares à direção da corrente, há simetria de translação. Portanto, obtemos de (1.10) um conjunto de equações unidimensionais desacopladas. Além disto, não se faz necessário resolver N^H equações, pois para cada par $\sigma\alpha$ a solução é a mesma. Desta forma, será apenas necessário resolver quatro equações unidimensionais. Veremos como resolver estas equações no capítulo 3.

1.5 Transporte quântico e o tunelamento ressonante

Após apresentar alguns fatores importantes para a condução do projeto, tratarei do transporte de portadores (buracos) através do dispositivo. Devido ao confinamento dos buracos, temos na direção z um sistema discretizado e, portanto, há a formação de um gás bidimensional de buracos. Este gás tem uma baixa densidade de portadores e, assim, um comprimento de onda de Fermi grande. Neste projeto, estamos tratando de um sistema nanoscópico no qual há conservação de coerência de fase, ou seja, as dimensões do dispositivo (L_i) são menores que o comprimento de coerência de fase (l_φ). Sistemas que combinam comprimento de onda de Fermi grande e conservação de coerência de fase são bem descritos pelo transporte quântico. Um fator importante no tratamento do transporte quântico é o livre caminho médio (l). Este pode distinguir o transporte difusivo, no qual o livre caminho médio é menor que as dimensões do sistema ($l < L_i$), do transporte balístico, no qual o livre caminho médio é maior que as dimensões do sistema ($l > L_i$). Devido às dimensões do nosso sistema, este se encontra no regime de transporte balístico. Neste regime a condutividade local não representa um papel importante, apenas a condutância, pois esta não pode ser expressa em função da condutividade como no transporte difusivo. Uma alternativa é utilizar a fórmula de Landauer para expressar a condutância em termos das propriedades da amostra perto do nível de Fermi. Esta fórmula trata a condutância como um problema de transmissão. No regime balístico, fenômenos de interferência como o tunelamento ressonante [35] se tornam importantes. Este fenômeno tem um papel crucial para a geração de correntes polarizadas por spin no modelo de dispositivo que propomos. Para uma revisão de transporte quântico em nanoestruturas ver [36]. A região do material mostrada na figura 1.2 (região com potencial não uniforme) será chamada de região de espalhamento ($j = 0, \dots, N - 1$). A região à esquerda da figura

será chamada de emissor ($j < 0$) e a região à direita de coletor ($j > N - 1$). Usarei esta nomenclatura, pois neste trabalho serão tratadas correntes de buracos que incidem pela esquerda da região de espalhamento e são transmitidos para a direita desta região. Além disto, representarei índices negativos por uma barra superior como medida de concisão e para evitar que, por exemplo, a seqüência de índices $i\bar{l}$ seja confundido com a diferença $i - l$. Sabemos que há uma probabilidade não nula de um buraco tunelar através de uma das barreiras e esta probabilidade depende da energia da partícula. Esta probabilidade é muito baixa e a probabilidade de um buraco tunelar duas barreiras é muito menor. Porém, no caso da dupla barreira, ocorre o tunelamento ressonante. As partículas incidentes na dupla barreira que tunelam através da primeira barreira ficam confinadas. Por ficar confinado, refletindo nas barreiras repetidas vezes, um buraco aumenta a probabilidade de tunelar através da segunda barreira. No interior da dupla barreira, formam-se níveis ressonantes. Haverá picos de transmissão quando os buracos tiverem energias próximas às energias dos níveis ressonantes da dupla barreira, que por sua vez têm dependência com o spin e com a massa efetiva. Ao se aplicar uma diferença de potencial V entre o emissor e o coletor da dupla barreira, os níveis ressonantes terão suas energias reduzidas. À medida que estes níveis se encontram entre 0 meV e a energia de Fermi no emissor é gerada uma corrente de buracos. Conforme V aumenta e a energia de um destes níveis passa para um valor menor que 0 meV, a corrente se extingue. Pelo fato de o coletor e o emissor estarem em equilíbrio, podemos definir nestes um nível de Fermi. Diferentemente, a região de espalhamento está fora do equilíbrio termodinâmico, porque está submetida à V . Conseqüentemente, não podemos definir nesta região um nível de Fermi. Portanto, chamarei a energia do estado mais alto ocupado de energia de ocupação (\mathcal{E}_{occ}). O formalismo utilizado aqui não é ideal para tratar sistemas fora de equilíbrio, o formalismo ideal seria o de funções de Green de Keldysh. Apesar disto, esperamos obter bons resultados qualitativamente. Neste modelo, consideramos que o emissor e o coletor recebem um grau de dopagem positiva de berílio, de forma que a energia de Fermi no emissor é 15 meV.

1.5.1 Coeficientes de Fresnel e Transmitância

Nesta seção, mostrarei como determinar os coeficientes de Fresnel de transmissão e reflexão que são grandezas importantes no cálculo da corrente através do dispositivo. No apêndice A são obtidas as relações de dispersão para os buracos no emissor e no coletor, a partir da solução da equação de Schrödinger. Desta solução, obtenho a componente z_j da função de onda discretizada: a equação (A.37). Começo os cálculos desta seção com esta solução para o emissor ($k'_z{}^\alpha = k_z^\alpha$):

$$\psi_j^{\sigma\alpha} = A_i^{\sigma\alpha} e^{ik_z^\alpha ja} + A_r^{\sigma\alpha} e^{-ik_z^\alpha ja}. \quad (1.11)$$

Desta forma, nos dois últimos planos do emissor, tenho as seguintes expressões para as funções de onda:

$$\psi_2^{\sigma\alpha} = A_i^{\sigma\alpha} e^{-2ik_z^\alpha a} + A_r^{\sigma\alpha} e^{2ik_z^\alpha a} \quad (1.12)$$

$$\psi_1^{\sigma\alpha} = A_i^{\sigma\alpha} e^{-ik_z^\alpha a} + A_r^{\sigma\alpha} e^{ik_z^\alpha a} \quad (1.13)$$

ou, escrevendo estas como um sistema de equações matricial,

$$\begin{pmatrix} e^{-2ik_z^\alpha a} & e^{2ik_z^\alpha a} \\ e^{-ik_z^\alpha a} & e^{ik_z^\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_i^{\sigma\alpha} \\ A_r^{\sigma\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_2^{\sigma\alpha} \\ \psi_1^{\sigma\alpha} \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

Será descrito, mais adiante no capítulo 3, o formalismo que nos permite calcular $\psi_2^{\sigma\alpha}$ e $\psi_1^{\sigma\alpha}$ em função de $A_t^{\sigma\alpha}$. Assim, podemos resolver este sistema e obter $A_i^{\sigma\alpha}$ e $A_r^{\sigma\alpha}$:

$$\Delta = \begin{vmatrix} e^{-2ik_z^\alpha a} & e^{2ik_z^\alpha a} \\ e^{-ik_z^\alpha a} & e^{ik_z^\alpha a} \end{vmatrix} = e^{-ik_z^\alpha a} - e^{ik_z^\alpha a} = -2i\text{sen}(k_z^\alpha a) \quad (1.15)$$

$$\Delta_i = \begin{vmatrix} \psi_2^{\sigma\alpha} & e^{2ik_z^\alpha a} \\ \psi_1^{\sigma\alpha} & e^{ik_z^\alpha a} \end{vmatrix} = \psi_2^{\sigma\alpha} e^{ik_z^\alpha a} - \psi_1^{\sigma\alpha} e^{2ik_z^\alpha a} \quad (1.16)$$

$$\Delta_r = \begin{vmatrix} e^{-2ik_z^\alpha a} & \psi_2^{\sigma\alpha} \\ e^{-ik_z^\alpha a} & \psi_1^{\sigma\alpha} \end{vmatrix} = \psi_1^{\sigma\alpha} e^{-2ik_z^\alpha a} - \psi_2^{\sigma\alpha} e^{-ik_z^\alpha a} \quad (1.17)$$

$$A_i^{\sigma\alpha} = \frac{\Delta_i}{\Delta} = \frac{\psi_1^{\sigma\alpha} e^{2ik_z^\alpha a} - \psi_2^{\sigma\alpha} e^{ik_z^\alpha a}}{2i\text{sen}(k_z^\alpha a)} \quad (1.18)$$

$$A_r^{\sigma\alpha} = \frac{\Delta_r}{\Delta} = \frac{\psi_2^{\sigma\alpha} e^{-ik_z^\alpha a} - \psi_1^{\sigma\alpha} e^{-2ik_z^\alpha a}}{2i\text{sen}(k_z^\alpha a)}. \quad (1.19)$$

Os coeficientes de transmissão e de reflexão para os buracos que incidem na dupla barreira são definidos da seguinte forma:

$$t^{\sigma\alpha} = \frac{A_t^{\sigma\alpha}}{A_i^{\sigma\alpha}} \quad ; \quad r^{\sigma\alpha} = \frac{A_r^{\sigma\alpha}}{A_i^{\sigma\alpha}} \quad (1.20)$$

onde $A_i^{\sigma\alpha}$, $A_t^{\sigma\alpha}$ e $A_r^{\sigma\alpha}$ são, respectivamente, as amplitudes das funções de onda para buracos incidentes na dupla barreira, transmitidos e refletidos por ela. Além disso, defino

$$T^{\sigma\alpha} = |t^{\sigma\alpha}|^2 = \left| \frac{A_t^{\sigma\alpha}}{A_i^{\sigma\alpha}} \right|^2 \quad ; \quad R^{\sigma\alpha} = |r^{\sigma\alpha}|^2 = \left| \frac{A_r^{\sigma\alpha}}{A_i^{\sigma\alpha}} \right|^2 \quad (1.21)$$

que são transmitância e refletância respectivamente. $R^{\sigma\alpha} + T^{\sigma\alpha} = 1$ quando não há V aplicada.

Combino (1.20) com as equações (1.18) e (1.19) para calcular os coeficientes de Fresnel de transmissão e de reflexão:

$$t^{\sigma\alpha} = \frac{A_t^{\sigma\alpha}}{A_i^{\sigma\alpha}} = \frac{2i\text{sen}(k_z^\alpha a)}{\psi_1^{\sigma\alpha} e^{2ik_z^\alpha a} - \psi_2^{\sigma\alpha} e^{ik_z^\alpha a}} A_t^{\sigma\alpha} \quad (1.22)$$

$$r^{\sigma\alpha} = \frac{A_r^{\sigma\alpha}}{A_i^{\sigma\alpha}} = \frac{\psi_2^{\sigma\alpha} e^{-ik_z^\alpha a} - \psi_1^{\sigma\alpha} e^{-2ik_z^\alpha a}}{\psi_1^{\sigma\alpha} e^{2ik_z^\alpha a} - \psi_2^{\sigma\alpha} e^{ik_z^\alpha a}}. \quad (1.23)$$

Capítulo 2

Corrente

Exporei neste capítulo o tratamento matemático do cálculo das correntes de buracos através do dispositivo. A probabilidade de acharmos um buraco com spin σ e massa efetiva $m^{*\alpha}$ na região em torno de um dos planos j da rede é proporcional a $e|\psi_j^{\sigma\alpha}|^2$. Esta é uma relação de igualdade no caso da função de onda estar normalizada. Na aproximação de buraco independente, a contribuição de um buraco para a carga de um dos planos j perpendiculares ao eixo z é:

$$q_j^{\sigma\alpha} = e|\psi_j^{\sigma\alpha}|^2. \quad (2.1)$$

2.1 Equação de continuidade

Para construir a equação de continuidade, devo trabalhar com a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$\mathcal{H}^{\sigma\alpha}\Psi^{\sigma\alpha}(x, y, z, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^{\sigma\alpha}(x, y, z, t). \quad (2.2)$$

Realizo novamente uma separação de variáveis (a separação de variáveis é descrita no apêndice A), além de utilizar a forma discretizada da componente z da função de onda. Portanto, tenho:

$$\Psi^{\sigma\alpha}(x, y, z, t) = X(x)^\alpha Y(y)^\alpha Z^{\sigma\alpha}(z_j, t). \quad (2.3)$$

Utilizarei para a função $Z^{\sigma\alpha}(z_j, t)$, que combina as componentes z , de spin e temporal, a seguinte nomenclatura:

$$Z^{\sigma\alpha}(z_j, t) = \psi_j^{\sigma\alpha}(t). \quad (2.4)$$

A partir da equação (A.34) posso escrever a parte unidimensional, na direção z , da equação de Schrödinger dependente do tempo que inclui a componente de spin,

$$v^\alpha \left[\overline{\psi_{j-1}^{\sigma\alpha}}(t) - 2\psi_j^{\sigma\alpha}(t) + \psi_{j+1}^{\sigma\alpha}(t) \right] + U_j^{\sigma\alpha} \psi_j^{\sigma\alpha}(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_j^{\sigma\alpha}(t), \quad (2.5)$$

onde v^α é definido em (A.33). A partir da equação (2.1) posso escrever

$$\frac{\partial q_j^{\sigma\alpha}}{\partial t} = e \frac{\partial}{\partial t} |\psi_j^{\sigma\alpha}|^2 = e \frac{\partial}{\partial t} (\psi_j^{\sigma\alpha*} \psi_j^{\sigma\alpha}) = e \left(\psi_j^{\sigma\alpha*} \frac{\partial}{\partial t} \psi_j^{\sigma\alpha} + \psi_j^{\sigma\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \psi_j^{\sigma\alpha*} \right). \quad (2.6)$$

Além disso, obtenho da equação (2.5)

$$\psi_j^{\sigma\alpha*} \frac{\partial}{\partial t} \psi_j^{\sigma\alpha} = \frac{\psi_j^{\sigma\alpha*}}{i\hbar} \left[v^\alpha (\psi_{j-1}^{\sigma\alpha} - 2\psi_j^{\sigma\alpha} + \psi_{j+1}^{\sigma\alpha}) + U_j^{\sigma\alpha} \psi_j^{\sigma\alpha} \right], \quad (2.7)$$

e, do complexo conjugado de (2.7), tenho:

$$\psi_j^{\sigma\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \psi_j^{\sigma\alpha*} = -\frac{\psi_j^{\sigma\alpha}}{i\hbar} \left[v^\alpha (\psi_{j-1}^{\sigma\alpha*} - 2\psi_j^{\sigma\alpha*} + \psi_{j+1}^{\sigma\alpha*}) + U_j^{\sigma\alpha} \psi_j^{\sigma\alpha*} \right]. \quad (2.8)$$

Portanto, a combinação das equações (2.6), (2.7) e (2.8), fornece-me:

$$\frac{\partial q_j^{\sigma\alpha}}{\partial t} = \frac{ev^\alpha}{i\hbar} \left[(\psi_j^{\sigma\alpha*} \psi_{j-1}^{\sigma\alpha} - \psi_j^{\sigma\alpha} \psi_{j-1}^{\sigma\alpha*}) - (\psi_j^{\sigma\alpha} \psi_{j+1}^{\sigma\alpha*} - \psi_j^{\sigma\alpha*} \psi_{j+1}^{\sigma\alpha}) \right]. \quad (2.9)$$

Lembrando-se das relações abaixo

$$\psi_j^{\sigma\alpha*} \psi_{j-1}^{\sigma\alpha} - \psi_j^{\sigma\alpha} \psi_{j-1}^{\sigma\alpha*} = 2i \text{Im}(\psi_j^{\sigma\alpha*} \psi_{j-1}^{\sigma\alpha}) \quad (2.10)$$

e

$$\psi_j^{\sigma\alpha} \psi_{j+1}^{\sigma\alpha*} - \psi_j^{\sigma\alpha*} \psi_{j+1}^{\sigma\alpha} = 2i \text{Im}(\psi_j^{\sigma\alpha} \psi_{j+1}^{\sigma\alpha*}) \quad (2.11)$$

obtenho, então,

$$\frac{\partial q_j^{\sigma\alpha}}{\partial t} = \frac{2ev^\alpha}{\hbar} \left[\text{Im}(\psi_j^{\sigma\alpha*} \psi_{j-1}^{\sigma\alpha}) - \text{Im}(\psi_{j+1}^{\sigma\alpha*} \psi_j^{\sigma\alpha}) \right]. \quad (2.12)$$

Posso escrever a equação (2.12) da seguinte forma:

$$\frac{\partial q_j^{\sigma\alpha}}{\partial t} = I_{j-\frac{1}{2}}^{\sigma\alpha} - I_{j+\frac{1}{2}}^{\sigma\alpha}, \quad (2.13)$$

onde

$$I_{j-\frac{1}{2}}^{\sigma\alpha} \equiv \frac{2ev^\alpha}{\hbar} \text{Im}(\psi_j^{\sigma\alpha*} \psi_{j-1}^{\sigma\alpha}) \quad (2.14)$$

e

$$I_{j+\frac{1}{2}}^{\sigma\alpha} \equiv \frac{2ev^\alpha}{\hbar} \text{Im}(\psi_{j+1}^{\sigma\alpha*} \psi_j^{\sigma\alpha}) \quad (2.15)$$

são, respectivamente, as correntes de portadores definidas entre os planos $j - 1$ e j e entre os planos j e $j + 1$. A figura 2.1 mostra um diagrama ilustrativo das correntes definidas entre estes planos.

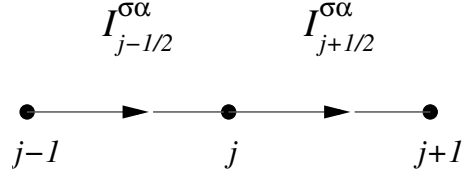


Figura 2.1: Diagrama que descreve a corrente entre os planos.

A equação (2.13) é a equação de continuidade. Esta mostra que o aumento da carga presente no plano j é igual a diferença entre a quantidade de carga que entra neste plano e a quantidade que sai do mesmo por unidade de tempo, isto é, que há conservação de carga no sistema.

2.2 Corrente de um portador

Calcularei a contribuição de um buraco à corrente definida no coletor de acordo com a equação (2.15). A função de onda deste buraco está caracterizada (na direção z) por um vetor de onda $k'_z{}^\alpha$. A definição de $k'_z{}^\alpha$ está no apêndice A e é dada pela equação (A.37). Por se tratar do coletor, esta função de onda é uma onda plana que se propaga na direção z positiva, e suas componentes em dois planos vizinhos podem ser escritas da seguinte forma:

$$\psi_j^{\sigma\alpha} = A_t^{\sigma\alpha} e^{ik'_z{}^\alpha z_j} \quad (2.16)$$

$$\psi_{j+1}^{\sigma\alpha} = A_t^{\sigma\alpha} e^{ik'_z{}^\alpha (z_j+a)}. \quad (2.17)$$

Portanto,

$$\psi_{j+1}^{\sigma\alpha*} = A_t^{\sigma\alpha*} e^{-ik'_z{}^\alpha (z_j+a)} = A_t^{\sigma\alpha*} e^{-ik'_z{}^\alpha z_j} e^{-ik'_z{}^\alpha a} \quad (2.18)$$

$$\psi_{j+1}^{\sigma\alpha*} \psi_j^{\sigma\alpha} = |A_t^{\sigma\alpha}|^2 e^{-ik'_z{}^\alpha a} = |A_t^{\sigma\alpha}|^2 [\cos(k'_z{}^\alpha a) - i \text{sen}(k'_z{}^\alpha a)] \quad (2.19)$$

$$\text{Im}(\psi_{j+1}^{\sigma\alpha*} \psi_j^{\sigma\alpha}) = -|A_t^{\sigma\alpha}|^2 \text{sen}(k'_z{}^\alpha a) \quad (2.20)$$

e

$$I_{j+\frac{1}{2}}^{\sigma\alpha} = -\frac{2ev^\alpha}{\hbar} |A_t^{\sigma\alpha}|^2 \text{sen}(k'_z{}^\alpha a). \quad (2.21)$$

A equação (2.21) mostra que, para um estado estacionário, no coletor a corrente é, na verdade, independente de j . Então, esta equação me fornece um meio de calcular a contribuição de qualquer portador para a corrente. A partir da relação de dispersão para buracos no coletor, obtida no apêndice A na equação (A.42), posso escrever a velocidade de grupo para buracos no coletor:

$$v_c^\alpha = \frac{\partial \mathcal{E}_z^\alpha}{\partial p_z^\alpha} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_z^\alpha}{\partial k_z^\alpha} = -\frac{2av^\alpha}{\hbar} \text{sen}(k_z^\alpha a). \quad (2.22)$$

Portanto, a partir de (2.21), posso reescrever a equação para a corrente de um portador,

$$I^{\sigma\alpha}(\mathcal{E}_z^\alpha) = \frac{e}{a} v_c^\alpha |A_t^{\sigma\alpha}|^2. \quad (2.23)$$

Posso também caracterizar o transporte de um buraco definindo o tempo clássico que ele leva passando de um plano j para o próximo,

$$\tau^\alpha = \left(\frac{v_c^\alpha}{a} \right)^{-1}. \quad (2.24)$$

Finalmente, obtenho a equação que calcula a contribuição de cada buraco para a corrente:

$$I^{\sigma\alpha}(\mathcal{E}_z^\alpha) = \frac{e}{\tau^\alpha} |A_t^{\sigma\alpha}|^2 = \frac{e}{\tau^\alpha} |A_i^{\sigma\alpha}|^2 T^{\sigma\alpha}. \quad (2.25)$$

Através de uma análise dimensional, vemos que (2.25) é uma expressão para correntes de buracos. Defino $I_0^\alpha \equiv \frac{e}{\tau^\alpha}$ que é a unidade de corrente para um buraco, já que $|A_i^{\sigma\alpha}|^2$ e $T^{\sigma\alpha}$ são adimensionais. Ambos $|A_t^{\sigma\alpha}|^2$ e τ^α dependem da energia, então temos uma expressão da corrente em função da energia. Vemos em (2.25) que a corrente é diretamente proporcional à transmitância. Como foi dito por Landauer, no transporte balístico “corrente é transmitância” [37, 38]. No apêndice B, é imposta a normalização da função de onda dos buracos em todo o dispositivo. Desta normalização é obtida uma expressão para $|A_i^{\sigma\alpha}|^2$ em função de $R^{\sigma\alpha}$ e $T^{\sigma\alpha}$.

2.3 Corrente total

Contribuem para a corrente todos os buracos que estão entre 0 e \mathcal{E}_F no emissor. Em 3 dimensões, estes buracos ocupam, respeitando o princípio de exclusão de Pauli e a temperatura zero, uma esfera no espaço recíproco com raio k_F (esfera de Fermi). Devo impor condições de contorno para a função de onda no dispositivo. A melhor escolha é de condições periódicas de contorno, pois resultam em ondas que se propagam. Como aqui é tratado o transporte de cargas, esta é a escolha mais conveniente. Nos cálculos a seguir, que se concluem com a determinação da densidade de estados, não farei considerações a respeito de spin nem massa efetiva, pois estes não influem no cálculo. Imagino o material

em questão como um paralelepípedo de dimensões L_x , L_y e L_z , no qual cada face está em contato com a face oposta. Isto resulta no seguinte conjunto de condições:

$$X(x) = X(x + L_x) \quad , \quad Y(y) = Y(y + L_y) \quad , \quad Z(z) = Z(z + L_z). \quad (2.26)$$

No apêndice A, obtive as seguintes soluções para as componentes x , y e z da função de onda de um buraco no sistema:

$$X = A_{x\pm} e^{\pm i k_x x} \quad , \quad Y = A_{y\pm} e^{\pm i k_y y} \quad , \quad Z = A_{z\pm} e^{\pm i k_z z}. \quad (2.27)$$

Impondo as condições de contorno na componente x obtenho

$$\begin{aligned} A_{x\pm} e^{\pm i k_x x} &= A_{x\pm} e^{\pm i k_x (x+L_x)} \\ &= A_{x\pm} e^{\pm i k_x x \pm i k_x L_x} \end{aligned} \quad (2.28)$$

ou

$$e^{\pm i k_x L_x} = 1. \quad (2.29)$$

Esta equação fornece a condição:

$$k_x = \pm \frac{2n_x \pi}{L_x} \quad (2.30)$$

onde n_x é um número inteiro.

De forma análoga, obtenho

$$k_y = \pm \frac{2n_y \pi}{L_y} \quad (2.31)$$

e

$$k_z = \pm \frac{2n_z \pi}{L_z} \quad (2.32)$$

nos quais n_y e n_z são números inteiros. Portanto, os vetores de onda que caracterizam uma partícula livre no material são

$$\mathbf{k} = \left(\pm \frac{2n_x \pi}{L_x}, \pm \frac{2n_y \pi}{L_y}, \pm \frac{2n_z \pi}{L_z} \right). \quad (2.33)$$

O volume no espaço recíproco que contém um estado é

$$\mathcal{V}_k = \frac{2\pi}{L_x} \frac{2\pi}{L_y} \frac{2\pi}{L_z} = \frac{8\pi^3}{\mathcal{V}_R} \quad (2.34)$$

onde \mathcal{V}_R é o volume do dispositivo no espaço real.

O número de buracos por unidade de volume no espaço recíproco é

$$\rho_k = \frac{1}{\mathcal{V}_k} = \frac{\mathcal{V}_R}{8\pi^3} = \frac{L_z S}{8\pi^3} \quad (2.35)$$

no qual $S = L_x L_y$.

Farei uma mudança para um sistema de coordenadas cilíndricas no espaço recíproco, $\mathbf{k} = (k_{\parallel}, \phi, k_z)$. O volume de um disco da esfera de Fermi com altura dk_z e raio $k_{\parallel} = k_r$, mostrado na figura 2.2, é $\pi k_r^2 dk_z$. Portanto, o número de estados em cada disco da esfera é

$$\rho_k d^3 \mathbf{k} = \rho_k \pi k_r^2 dk_z = \frac{L_z S}{8\pi^2} k_r^2 dk_z, \quad (2.36)$$

além disto,

$$k_r^2 = k_F^2 - k_z^2. \quad (2.37)$$

Portanto,

$$\rho_k \pi k_r^2 dk_z = \frac{L_z S}{8\pi^2} (k_F^2 - k_z^2) dk_z. \quad (2.38)$$

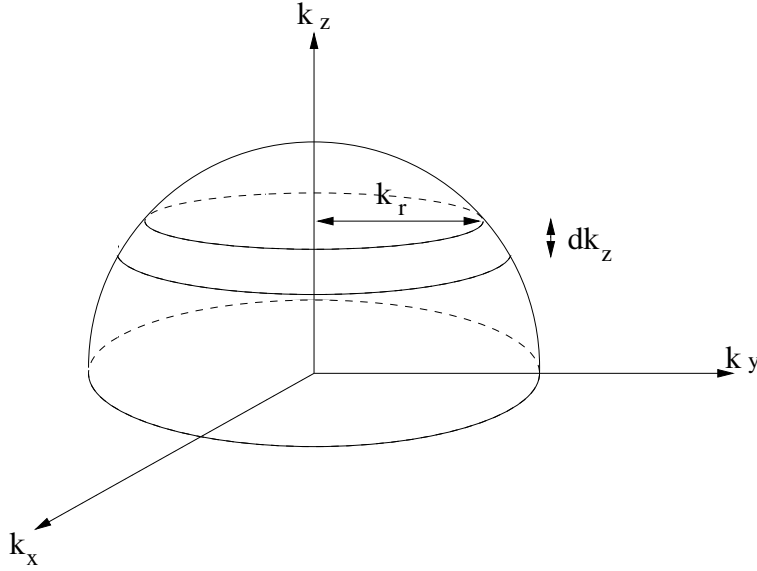


Figura 2.2: Semi-esfera de Fermi.

A corrente total deve levar em consideração apenas os estados compreendidos na semi-esfera de Fermi que têm k_z positivo, pois estes representam transporte de partículas na direção z positiva. Desta forma, a corrente total I_T é:

$$I_T = \sum_{occ} I(\mathcal{E}_z) = \int I(\mathcal{E}_z) \rho_k d^3 \mathbf{k}. \quad (2.39)$$

O somatório acima é sobre todos os estados ocupados. Ao substituir a expressão de $\rho_k d^3\mathbf{k}$, dada por (2.36), na equação (2.39) obtenho

$$I_T = \int I(\mathcal{E}_z) \rho_k \pi k_r^2 dk_z = \frac{L_z S}{8\pi^2} \int (k_F^2 - k_z^2) I(\mathcal{E}_z) dk_z. \quad (2.40)$$

É mais conveniente mudar a variável de integração para a energia. Além disto, a partir deste ponto colocarei os índices de spin e massa efetiva. Então, reescrevo (2.40) da seguinte forma

$$I_T^{\sigma\alpha} = \frac{m^{*\alpha} L_z S}{4\hbar^2 \pi^2} \int \left[\frac{\hbar^2 (k_F^\alpha)^2}{2m^{*\alpha}} - \frac{\hbar^2 (k_z^\alpha)^2}{2m^{*\alpha}} \right] I^{\sigma\alpha}(\mathcal{E}_z^\alpha) \left(\frac{dk_z^\alpha}{d\mathcal{E}_z^\alpha} \right) d\mathcal{E}_z^\alpha \quad (2.41)$$

ou

$$I_T^{\sigma\alpha} = \frac{m^{*\alpha} L_z S}{4\hbar^2 \pi^2} \int (\mathcal{E}_F - \mathcal{E}_z^\alpha) I^{\sigma\alpha}(\mathcal{E}_z^\alpha) \left(\frac{dk_z^\alpha}{d\mathcal{E}_z^\alpha} \right) d\mathcal{E}_z^\alpha, \quad (2.42)$$

onde $\mathcal{E}_F = \frac{\hbar^2 (k_F^\alpha)^2}{2m^{*\alpha}}$. No emissor e no coletor, os HH e LH estão em equilíbrio termodinâmico, portanto, existe um potencial químico e uma energia de Fermi \mathcal{E}_F válida para os buracos em equilíbrio.

Considerarei a partir deste ponto algumas aproximações. Para valores considerados neste projeto, $k_z'^\alpha a \ll 1$ e $k_z^\alpha a \ll 1$ de forma que eu posso considerar as seguintes aproximações para o $\text{sen}(k_z'^\alpha a)$ e para o $\text{cos}(k_z^\alpha a)$:

$$\text{sen}(k_z^\alpha a) \approx k_z^\alpha a \quad (2.43)$$

$$\text{cos}(k_z^\alpha a) \approx 1 - \frac{(k_z^\alpha)^2 a^2}{2}. \quad (2.44)$$

A partir destas aproximações, reescrevo \mathcal{E}_z^α no emissor (A.43) e v_c^α (2.22):

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_z^\alpha &= 2v^\alpha \left[1 - \frac{(k_z^\alpha)^2 a^2}{2} - 1 \right] \\ &= - \left(-\frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha} a^2} \right) (k_z^\alpha)^2 a^2 \\ &= \frac{\hbar^2 (k_z^\alpha)^2}{2m^{*\alpha}} \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} v_c^\alpha &= - \left(\frac{2av^\alpha}{\hbar} \right) k_z'^\alpha a = -\frac{2a}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha} a^2} \right) k_z'^\alpha a \\ &= \frac{\hbar k_z'^\alpha}{m^{*\alpha}}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Com referência em (2.45) e (2.46) calculo $\frac{dk_z^\alpha}{d\mathcal{E}_z^\alpha}$ e $I^{\sigma\alpha}(\mathcal{E}_z^\alpha)$:

$$\frac{dk_z^\alpha}{d\mathcal{E}_z^\alpha} = \frac{1}{\frac{d\mathcal{E}_z^\alpha}{dk_z^\alpha}} = \frac{m^{*\alpha}}{\hbar^2 k_z^\alpha} \quad (2.47)$$

$$I^{\sigma\alpha}(\mathcal{E}_z^\alpha) = \frac{e}{a} \left(\frac{\hbar k_z^{\prime\alpha}}{m^{*\alpha}} \right) |A_i^{\sigma\alpha}|^2. \quad (2.48)$$

Substituo as expressões dadas por (2.47) e (2.48) na equação (2.41) para obter

$$I_T^{\sigma\alpha} = \frac{m^{*\alpha} e L_z S}{4\hbar^3 \pi^2} \int_0^{\mathcal{E}_F} (\mathcal{E}_F - \mathcal{E}_z^\alpha) \frac{k_z^{\prime\alpha}}{k_z^\alpha} \frac{|A_i^{\sigma\alpha}|^2 T^{\sigma\alpha}}{a} d\mathcal{E}_z^\alpha \quad (2.49)$$

Como mencionado anteriormente, $|A_i^{\sigma\alpha}|^2$ é calculado no apêndice B e este resultado está na equação (B.27). Utilizando esta equação obtenho

$$\begin{aligned} I_T^{\sigma\alpha} &= \frac{m^{*\alpha} e L_z S}{4\hbar^3 \pi^2} \int_0^{\mathcal{E}_F} (\mathcal{E}_F - \mathcal{E}_z^\alpha) \frac{k_z^{\prime\alpha}}{k_z^\alpha} \frac{T^{\sigma\alpha}}{a} \frac{2a}{L_z (1 + R^{\sigma\alpha} + T^{\sigma\alpha})} d\mathcal{E}_z^\alpha \\ &= \frac{m^{*\alpha} e S}{2\hbar^3 \pi^2} \int_0^{\mathcal{E}_F} (\mathcal{E}_F - \mathcal{E}_z^\alpha) \frac{k_z^{\prime\alpha}}{k_z^\alpha} \frac{T^{\sigma\alpha}}{(1 + R^{\sigma\alpha} + T^{\sigma\alpha})} d\mathcal{E}_z^\alpha \end{aligned} \quad (2.50)$$

sendo $k_z^{\prime\alpha}$, k_z^α , $T^{\sigma\alpha}$ e $R^{\sigma\alpha}$ dependentes de \mathcal{E}_z^α . A equação (2.50) me permite calcular a corrente total de buracos para cada par $\sigma\alpha$ independentemente.

Capítulo 3

Tratamento de um sistema aberto

Neste capítulo, tratarei do formalismo do método empregado na solução da componente z da equação de Schrödinger para o sistema completo após a separação de variáveis. Deste ponto em diante, suprimirei o subíndice z . O sistema na direção z é infinito e não tem simetria de translação. Para resolver este sistema exatamente, proponho cortá-lo em três regiões, o emissor, a região de espalhamento e o coletor. Estas podem ser resolvidas, individualmente, de forma exata porque o nosso método consiste de um processo não-perturbativo. A equação de Schrödinger é resolvida matricialmente para a região de espalhamento, na qual U^σ não é constante. No coletor e no emissor, o perfil de energia potencial é constante e, portanto, as soluções são ondas planas. Em seguida, as energias dos planos \bar{I} (último plano do emissor) e N (primeiro plano do coletor) e os seus “hoppings” são renormalizados de forma a dizimar as soluções da região de espalhamento e estabelecer uma relação entre as soluções do coletor e do emissor através de um reacoplamento exato. Este método de dizimação [15, 16] é equivalente ao método de impor, através do dispositivo, a continuidade das funções de onda que descrevem os buracos e das derivadas destas. O primeiro vale para o espaço discreto e o segundo para o espaço contínuo.

3.1 Equação de Schrödinger matricial

Tenho de resolver a seguinte equação de autovalores (1.10) para a componente z , agora escrita na notação de Dirac:

$$\mathcal{H}^{\sigma\alpha} | \psi^{\sigma\alpha} \rangle = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} | \psi^{\sigma\alpha} \rangle \quad (3.1)$$

na qual $\mathcal{H}^{\sigma\alpha}$, $\mathcal{E}^{\sigma\alpha}$ e $| \psi^{\sigma\alpha} \rangle$ são respectivamente o operador Hamiltoniano, seus autovalores e os autoestados associados a estes autovalores na direção z . Devo lembrar que há quatro pares $\sigma\alpha$, ou seja, (3.1) corresponde a quatro equações.

Primeiramente, defino a base ortonormal canônica:

$$|i\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij} \quad (3.3)$$

onde o valor 1 corresponde ao plano i . A equação (3.2) contém uma expressão matricial de um orbital de Wannier.

Além disto,

$$|\psi^{\sigma\alpha}\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_1^{\sigma\alpha} \\ \psi_2^{\sigma\alpha} \\ \psi_3^{\sigma\alpha} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

de forma que

$$\psi_i^{\sigma\alpha} = \langle i | \psi^{\sigma\alpha} \rangle \quad (3.5)$$

e

$$|\psi^{\sigma\alpha}\rangle = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \psi_i^{\sigma\alpha} |i\rangle. \quad (3.6)$$

Posso escrever também, nesta base, os operadores de projeção

$$\wp(i) = |i\rangle\langle i| \quad (3.7)$$

e a relação de completeza

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}. \quad (3.8)$$

Desejo, primeiramente, escrever a equação de Schrödinger em forma matricial. Introduzo a relação de completeza no lado esquerdo do sinal de igual da equação (3.1):

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} \mathcal{H}^{\sigma\alpha} |i\rangle\langle i| \psi^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} |\psi^{\sigma\alpha}\rangle \quad (3.9)$$

e aplico $\langle j |$ à esquerda da equação (3.9):

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} \langle j | \mathcal{H}^{\sigma\alpha} | i \rangle \langle i | \psi^{\sigma\alpha} \rangle = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \langle j | \psi^{\sigma\alpha} \rangle. \quad (3.10)$$

Utilizando a equação (3.5), obtenho

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} \langle j | \mathcal{H}^{\sigma\alpha} | i \rangle \psi_i^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \psi_j^{\sigma\alpha}. \quad (3.11)$$

Em seguida, defino o elemento de matriz do operador hamiltoniano

$$H_{ji}^{\sigma\alpha} \equiv \langle j | \mathcal{H}^{\sigma\alpha} | i \rangle \quad (3.12)$$

e, assim, a equação (3.11) fica da seguinte forma,

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} H_{ji}^{\sigma\alpha} \psi_i^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \psi_j^{\sigma\alpha}. \quad (3.13)$$

Finalmente, escrevo a equação de autovalores (3.1) em forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \\ \cdots & H_{11}^{\sigma\alpha} & H_{12}^{\sigma\alpha} & \cdots \\ \cdots & H_{21}^{\sigma\alpha} & H_{22}^{\sigma\alpha} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_1^{\sigma\alpha} \\ \psi_2^{\sigma\alpha} \\ \vdots \end{pmatrix} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_1^{\sigma\alpha} \\ \psi_2^{\sigma\alpha} \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

A matriz que representa o operador hamiltoniano neste caso é tridiagonal. No apêndice A, obtenho a equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo em diferenças finitas (equação (A.34)) que pode ser escrita de maneira diferente:

$$v^\alpha \psi_{j-1}^{\sigma\alpha} + (U_j^\sigma - 2v^\alpha) \psi_j^{\sigma\alpha} + v^\alpha \psi_{j+1}^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \psi_j^{\sigma\alpha} \quad (3.15)$$

ou

$$v^\alpha \psi_{j-1}^{\sigma\alpha} + \epsilon_j^{\sigma\alpha} \psi_j^{\sigma\alpha} + v^\alpha \psi_{j+1}^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \psi_j^{\sigma\alpha} \quad (3.16)$$

onde $\epsilon_j^{\sigma\alpha} = U_j^\sigma - 2v^\alpha$.

Esta equação me fornece os elementos de matriz da equação (3.14), que fica da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \ddots & \epsilon_1^{\sigma\alpha} & v^\alpha & 0 & \\ \ddots & v^\alpha & \epsilon_2^{\sigma\alpha} & v^\alpha & \ddots \\ & 0 & v^\alpha & \epsilon_3^{\sigma\alpha} & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_1^{\sigma\alpha} \\ \psi_2^{\sigma\alpha} \\ \psi_3^{\sigma\alpha} \\ \vdots \end{pmatrix} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_1^{\sigma\alpha} \\ \psi_2^{\sigma\alpha} \\ \psi_3^{\sigma\alpha} \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

No caso de um sistema finito, esta equação pode ser resolvida numericamente e assim eu obtenho seus autovalores e autoestados.

3.2 Desacoplamento do sistema

Neste ponto, realizo o corte (desacoplamento) artificial do sistema em três regiões. Inicialmente, o hamiltoniano pode ser dividido em duas partes:

$$\mathcal{H}^{\sigma\alpha} = \mathcal{H}_0^{\sigma\alpha} + \mathcal{H}_1^\alpha. \quad (3.18)$$

$\mathcal{H}_0^{\sigma\alpha}$ representa as três regiões desconexas e \mathcal{H}_1^α representa a conexão entre elas. Além disso, $\mathcal{H}_0^{\sigma\alpha}$ pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathcal{H}_0^{\sigma\alpha} = \mathcal{H}_E^\alpha + \mathcal{H}_S^{\sigma\alpha} + \mathcal{H}_C^\alpha \quad (3.19)$$

no qual \mathcal{H}_E^α , $\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}$ e \mathcal{H}_C^α são os hamiltonianos do emissor, da região de espalhamento e do coletor respectivamente. A figura 3.1 contém uma representação pictórica de $\mathcal{H}_0^{\sigma\alpha}$, onde o perfil de $\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}$ é ainda desconhecido. Somente $\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}$ tem índice de spin, pois os efeitos magnéticos estão restritos à região de espalhamento.

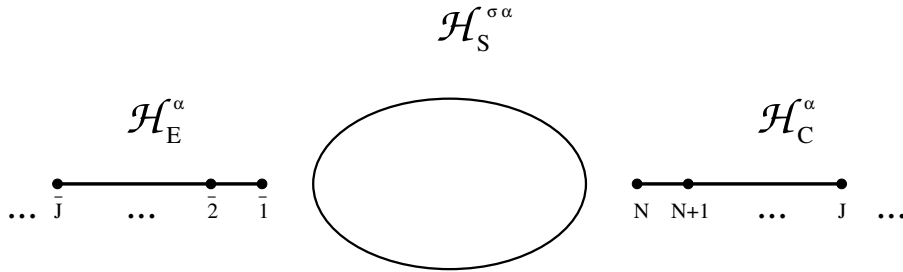


Figura 3.1: Representação do sistema cortado.

Após ter discutido brevemente o processo de desacoplamento do sistema, posso escrever $\mathcal{H}^{\sigma\alpha}$ como a seguinte matriz:

3.2.1 O emissor e o coletor

Primeiramente, partindo de (3.24), trataremos as regiões do emissor e do coletor.

Para $j \leq \bar{1}$, $\epsilon_j^{\sigma\alpha} = \epsilon_j^\alpha = -2v^\alpha$ então

$$v^\alpha \psi_{j-1}^{\sigma\alpha} - 2v^\alpha \psi_j^{\sigma\alpha} + v^\alpha \psi_{j+1}^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \psi_j^{\sigma\alpha} \quad (3.25)$$

onde $\langle j | \psi^{\sigma\alpha} \rangle = \psi_j^{\sigma\alpha}$.

Proponho soluções do tipo

$$\psi_j^{\sigma\alpha} = A_i^{\sigma\alpha} e^{ik_z^\alpha(ja)} + A_r^{\sigma\alpha} e^{-ik_z^\alpha(ja)}. \quad (3.26)$$

Estas soluções satisfazem (3.25) desde que k_z^α satisfaça a relação de dispersão

$$\mathcal{E}^\alpha = 2v^\alpha [1 - \cos(k_z^\alpha a)]. \quad (3.27)$$

Para $j \geq N$, $\epsilon_j^{\sigma\alpha} = \epsilon_j^\alpha = -2v^\alpha - eV$. Neste caso, da equação (3.24), obtenho

$$v^\alpha \psi_{j-1}^{\sigma\alpha} - (2v^\alpha + eV) \psi_j^{\sigma\alpha} + v^\alpha \psi_{j+1}^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \psi_j^{\sigma\alpha}. \quad (3.28)$$

Esta equação admite soluções do tipo

$$\psi_j^{\sigma\alpha} = A_t^{\sigma\alpha} e^{ik_z'^\alpha(ja)} \quad (3.29)$$

desde que $k_z'^\alpha$ satisfaça a relação de dispersão

$$\mathcal{E}^\sigma = 2v^\alpha [1 - \cos(k_z'^\alpha a)] - eV. \quad (3.30)$$

3.2.2 A região de espalhamento e suas fronteiras

Para tratar as equações que envolvem as funções de onda da região de espalhamento ($0 \leq j \leq N-1$) que está representada na figura 3.2, proponho uma base finita formada por N autoestados reais de $\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}$ (utilizarei as letras m e n para representar estes autoestados):

$$|m^{\sigma\alpha}\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} u_{im}^{\sigma\alpha} |i\rangle, \quad u_{im}^{\sigma\alpha*} = u_{im}^{\sigma\alpha} \quad (3.31)$$

onde cada autoestado está associado a um autovalor $\mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}$. A obtenção dos autoestados de $\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}$ é um problema de um sistema matricial e finito da forma de (3.17) que pode ser resolvido numericamente. A solução numérica é obtida rapidamente, pois a matriz tratada é tridiagonal. O hamiltoniano da região de espalhamento tem a seguinte composição:

$$\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha} = \mathcal{H}_K^\alpha + \mathcal{H}_U + \mathcal{H}_V + \mathcal{H}_M^\sigma + \mathcal{H}_{i-h} + \mathcal{H}_{h-h} \quad (3.32)$$

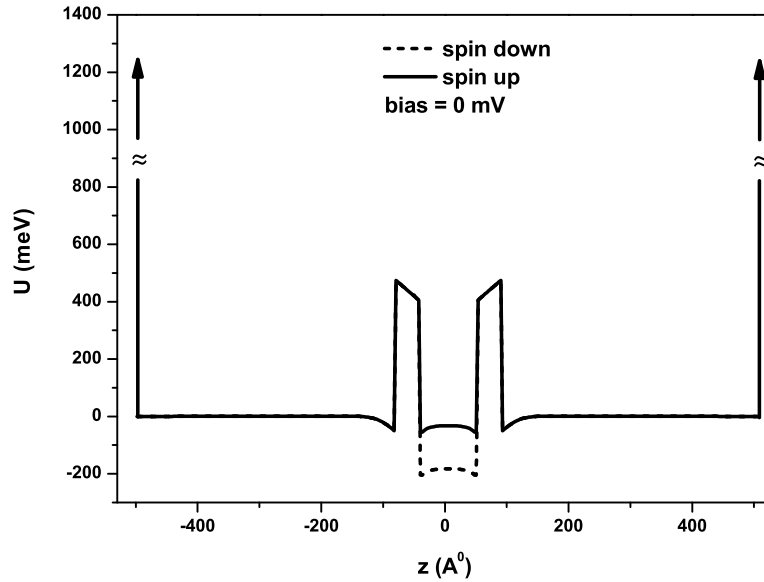


Figura 3.2: Poço infinito artificial que inclui a dupla barreira (perfil de $\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}$).

no qual \mathcal{H}_K^α representa a energia cinética dos buracos, \mathcal{H}_U o perfil de energia potencial da dupla barreira, \mathcal{H}_V o “splitting” da banda de valência na região magnética, \mathcal{H}_{i-h} a interação entre as impurezas e os buracos e \mathcal{H}_{h-h} representa a interação entre buracos. Como

$$\mathcal{H}_E^\alpha | m^{\sigma\alpha} \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \mathcal{H}_C^\alpha | m^{\sigma\alpha} \rangle = 0, \quad (3.33)$$

multiplicando (3.1) à esquerda por $\langle m^{\sigma\alpha} |$ obtenho

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \langle m^{\sigma\alpha} | \psi^{\sigma\alpha} \rangle &= \langle m^{\sigma\alpha} | \mathcal{H}^{\sigma\alpha} | \psi^{\sigma\alpha} \rangle = \langle m^{\sigma\alpha} | (\mathcal{H}_1^\alpha + \mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}) | \psi^{\sigma\alpha} \rangle \\ &= v^\alpha \langle m^{\sigma\alpha} | 0 \rangle \langle \bar{1} | \psi^{\sigma\alpha} \rangle + v^\alpha \langle m^{\sigma\alpha} | N-1 \rangle \langle N | \psi^{\sigma\alpha} \rangle + \\ &\quad + \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha} \langle m^{\sigma\alpha} | \psi^{\sigma\alpha} \rangle \end{aligned} \quad (3.34)$$

ou, de outra forma,

$$v_{1m}^{\sigma\alpha} \psi_{\bar{1}}^{\sigma\alpha} + \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha} \psi_m^{\sigma\alpha} + v_{mN}^{\sigma\alpha} \psi_N^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \psi_m^{\sigma\alpha} \quad (3.35)$$

onde

$$\begin{aligned} \psi_m^{\sigma\alpha} &= \langle m^{\sigma\alpha} | \psi^{\sigma\alpha} \rangle, \\ v_{1m}^{\sigma\alpha} &= v^\alpha u_{0m}^{\sigma\alpha} = v^\alpha \langle m^{\sigma\alpha} | 0 \rangle \quad \text{e} \\ v_{mN}^{\sigma\alpha} &= v^\alpha u_{N-1 m}^{\sigma\alpha} = v^\alpha \langle m^{\sigma\alpha} | N-1 \rangle. \end{aligned} \quad (3.36)$$

A equação (3.25) para $j = \bar{1}$ escreve-se

$$v^\alpha \psi_2^{\sigma\alpha} - 2v^\alpha \psi_1^{\sigma\alpha} + v^\alpha \psi_0^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \psi_1^{\sigma\alpha} \quad (3.37)$$

e a equação (3.28) para $j = N$ escreve-se

$$v^\alpha \psi_{N-1}^{\sigma\alpha} - (2v^\alpha + eV) \psi_N^{\sigma\alpha} + v^\alpha \psi_{N+1}^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \psi_N^{\sigma\alpha}. \quad (3.38)$$

Pela ortonormalidade dos $|m^{\sigma\alpha}\rangle$ posso escrever

$$\begin{aligned} \langle j | &= \sum_{m=0}^{N-1} \langle j | m^{\sigma\alpha} \rangle \langle m^{\sigma\alpha} | \\ &= \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} u_{jm}^{\sigma\alpha} \langle i | j \rangle \langle m^{\sigma\alpha} | \\ &= \sum_{m=0}^{N-1} u_{jm}^{\sigma\alpha} \langle m^{\sigma\alpha} |, \end{aligned} \quad (3.39)$$

pois $\langle i | j \rangle = \delta_{ij}$.

Para $0 \leq j \leq N-1$, primeiramente, escreverei $\psi_j^{\sigma\alpha}$ em função dos $\psi_m^{\prime\sigma\alpha}$. Ao multiplicar (3.39) por $|\psi^{\sigma\alpha}\rangle$ obtenho

$$\begin{aligned} \psi_j^{\sigma\alpha} &= \langle j | \psi^{\sigma\alpha} \rangle \\ &= \sum_{m=0}^{N-1} u_{jm}^{\sigma\alpha} \psi_m^{\prime\sigma\alpha}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Baseado em (3.40) e (3.36) obtenho

$$v^\alpha \psi_0^{\sigma\alpha} = \sum_{m=0}^{N-1} v^\alpha u_{0m}^{\sigma\alpha} \psi_m^{\prime\sigma\alpha} = \sum_{m=0}^{N-1} v_{1m}^{\sigma\alpha} \psi_m^{\prime\sigma\alpha} \quad (3.41)$$

e

$$v^\alpha \psi_{N-1}^{\sigma\alpha} = \sum_{m=0}^{N-1} v^\alpha u_{N-1 m}^{\sigma\alpha} \psi_m^{\prime\sigma\alpha} = \sum_{m=0}^{N-1} v_{mN}^{\sigma\alpha} \psi_m^{\prime\sigma\alpha}. \quad (3.42)$$

Substituo (3.41) e (3.42) nas equações (3.37) e (3.38), e junto com (3.35) obtenho o seguinte sistema de equações

$$v^\alpha \psi_2^{\sigma\alpha} + (\epsilon_1^\alpha - \mathcal{E}^{\sigma\alpha}) \psi_1^{\sigma\alpha} + \sum_{m=0}^{N-1} v_{1m}^{\sigma\alpha} \psi_m^{\prime\sigma\alpha} = 0 \quad (3.43)$$

$$v_{1m}^{\sigma\alpha} \psi_1^{\sigma\alpha} + (\mathcal{E}_m^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}^{\sigma\alpha}) \psi_m^{\prime\sigma\alpha} + v_{mN}^{\sigma\alpha} \psi_N^{\sigma\alpha} = 0 \quad (3.44)$$

$$\sum_{m=0}^{N-1} v_{mN}^{\sigma\alpha} \psi_m^{\prime\sigma\alpha} + (\epsilon_N^\alpha - \mathcal{E}^{\sigma\alpha}) \psi_N^{\sigma\alpha} + v^\alpha \psi_{N+1}^{\sigma\alpha} = 0. \quad (3.45)$$

Este sistema de equações representa o reacoplamento entre as três regiões e está representado diagramaticamente na figura 3.3.

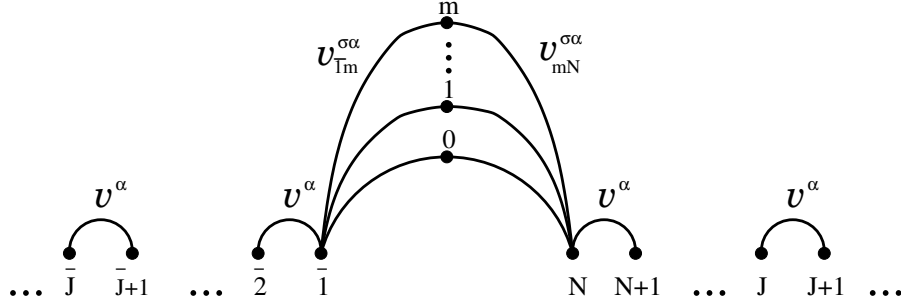


Figura 3.3: Reacoplamento das três regiões do sistema.

3.3 Dizimação das soluções de $\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}$ e o reacoplamento

Reduzirei o sistema (3.43), (3.44) e (3.45) a apenas duas equações eliminando todas as variáveis $\psi_m^{\prime\sigma\alpha}$. Em primeiro lugar, multiplico (3.44) por $\frac{v_{1m}^{\sigma\alpha}}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}}$ e somo para $m = 0, \dots, N-1$ para obter

$$\left(\sum_{m=0}^{N-1} \frac{(v_{1m}^{\sigma\alpha})^2}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}} \right) \psi_1^{\sigma\alpha} - \sum_{m=0}^{N-1} v_{1m}^{\sigma\alpha} \psi_m^{\prime\sigma\alpha} + \left(\sum_{m=0}^{N-1} \frac{v_{1m}^{\sigma\alpha} v_{mN}^{\sigma\alpha}}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}} \right) \psi_N^{\sigma\alpha} = 0. \quad (3.46)$$

Depois somo (3.46) a (3.43), obtendo assim

$$v^\alpha \psi_2^{\sigma\alpha} + \left(\epsilon_1^\alpha + \sum_{m=0}^{N-1} \frac{(v_{1m}^{\sigma\alpha})^2}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}} - \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \right) \psi_1^{\sigma\alpha} + \left(\sum_{m=0}^{N-1} \frac{v_{1m}^{\sigma\alpha} v_{mN}^{\sigma\alpha}}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}} \right) \psi_N^{\sigma\alpha} = 0. \quad (3.47)$$

Em segundo lugar, multiplico (3.44) por $\frac{v_{mN}^{\sigma\alpha}}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}}$ e somo para $m = 0, \dots, N-1$, chegando à equação

$$\left(\sum_{m=0}^{N-1} \frac{v_{1m}^{\sigma\alpha} v_{mN}^{\sigma\alpha}}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}} \right) \psi_1^{\sigma\alpha} - \sum_{m=0}^{N-1} v_{mN}^{\sigma\alpha} \psi_m^{\prime\sigma\alpha} + \left(\sum_{m=0}^{N-1} \frac{(v_{mN}^{\sigma\alpha})^2}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}} \right) \psi_N^{\sigma\alpha} = 0. \quad (3.48)$$

Então somo (3.48) a (3.45), o que me fornece

$$\left(\sum_{m=0}^{N-1} \frac{v_{1m}^{\sigma\alpha} v_{mN}^{\sigma\alpha}}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}} \right) \psi_1^{\sigma\alpha} + \left(\epsilon_N^\alpha + \sum_{m=0}^{N-1} \frac{(v_{mN}^{\sigma\alpha})^2}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}} - \mathcal{E}^{\sigma\alpha} \right) \psi_N^{\sigma\alpha} + v^\alpha \psi_{N+1}^{\sigma\alpha} = 0. \quad (3.49)$$

Defino as energias renormalizadas

$$\tilde{\epsilon}_1^{\sigma\alpha} = \epsilon_1^\alpha + \sum_{m=0}^{N-1} \frac{(v_{1m}^{\sigma\alpha})^2}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}} \quad (3.50)$$

$$\tilde{\epsilon}_N^{\sigma\alpha} = \epsilon_N^\alpha + \sum_{m=0}^{N-1} \frac{(v_{mN}^{\sigma\alpha})^2}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}} \quad (3.51)$$

e o “hopping” renormalizado

$$\tilde{v}_{1N}^{\sigma\alpha} = \sum_{m=0}^{N-1} \frac{v_{1m}^{\sigma\alpha} v_{mN}^{\sigma\alpha}}{\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_m^{\sigma\alpha}}. \quad (3.52)$$

Finalmente, após ter eliminado as soluções da região de espalhamento, obtenho o sistema que acopla as soluções do emissor às soluções do coletor:

$$v^\alpha \psi_2^{\sigma\alpha} + (\tilde{\epsilon}_1^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}^{\sigma\alpha}) \psi_1^{\sigma\alpha} + \tilde{v}_{1N}^{\sigma\alpha} \psi_N^{\sigma\alpha} = 0 \quad (3.53)$$

$$\tilde{v}_{1N}^{\sigma\alpha} \psi_1^{\sigma\alpha} + (\tilde{\epsilon}_N^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}^{\sigma\alpha}) \psi_N^{\sigma\alpha} + v^\alpha \psi_{N+1}^{\sigma\alpha} = 0. \quad (3.54)$$

Este sistema de equações está representado diagramaticamente na figura 3.4. Como, $\psi_N^{\sigma\alpha}$ e $\psi_{N+1}^{\sigma\alpha}$ são conhecidos, (3.54) fornece-me $\psi_1^{\sigma\alpha}$ e depois posso calcular $\psi_2^{\sigma\alpha}$ a partir de (3.53). Posso então, utilizando as equações (1.22), (1.23) e (1.21), calcular transmitância e refletância dos buracos através da região de espalhamento.

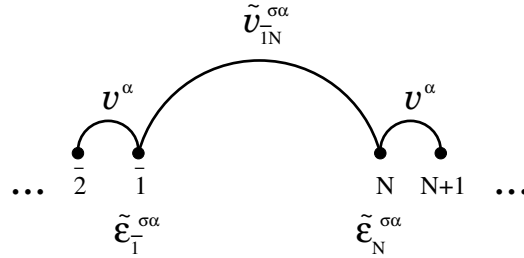


Figura 3.4: Sistema renormalizado após dizimação das soluções de $\mathcal{H}_S^{\sigma\alpha}$.

Capítulo 4

Solução autoconsistente

Tratarei neste capítulo de como são calculados, autoconsistentemente, a distribuição de cargas e o perfil de potencial na região de espalhamento. Há necessidade de um cálculo autoconsistente, pois a solução deste problema sai de um sistema de equações não linear. Ao partir de uma distribuição de cargas, é possível calcular o perfil de potencial e, conseqüentemente, de energia potencial. Esta é parte do Hamiltoniano que, por sua vez, determina os autovalores e autoestados deste problema. Conforme veremos a seguir, o cálculo da distribuição de cargas depende de ambos, autovalores e autoestados. Portanto, a distribuição de cargas definida em cada plano depende da distribuição de todos os outros planos. Foi utilizado computacionalmente um método quase-Newton para achar as soluções autoconsistentes.

4.1 A distribuição de cargas

Primeiramente, discutirei o cálculo da distribuição de cargas, para o qual será necessário atender à neutralidade de cargas e à distinção entre LH e HH. A probabilidade de encontrar um buraco, com massa $m^{*\alpha}$ e spin σ , no estado \mathbf{k} em um volume $d^3\mathbf{r}$ centrado em \mathbf{r} é

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{\sigma\alpha}(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r}. \quad (4.1)$$

Conforme a equação (2.1), a contribuição deste buraco no estado \mathbf{k} para a carga do sistema é

$$q_{\mathbf{k}}^{\sigma\alpha} = e|\psi_{\mathbf{k}}^{\sigma\alpha}(\mathbf{r})|^2. \quad (4.2)$$

Portanto, a contribuição total q dos buracos para a carga do sistema será dada pela soma de $q_{\mathbf{k}}^{\sigma\alpha}$ para todos os estados ocupados, ou seja,

$$q = \sum_{\mathbf{k}(\sigma\alpha)} q_{\mathbf{k}}^{\sigma\alpha} = \sum_{\mathbf{k}(\sigma\alpha)} e|\psi_{\mathbf{k}}^{\sigma\alpha}(\mathbf{r})|^2. \quad (4.3)$$

4.1.1 Ocupação do sistema

Cada estado da região de espalhamento é formado por uma componente discreta na direção z e por uma componente contínua pertencente aos planos perpendiculares à direção z e caracterizada por um vetor de onda $\mathbf{k}_{\parallel}^{\alpha} = (k_x^{\alpha}, k_z^{\alpha})$. A energia correspondente à componente contínua é

$$\mathcal{E}_{\parallel}^{\alpha} = \frac{\hbar^2(k_{\parallel}^{\alpha})^2}{2m^{*\alpha}} = \frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha}} [(k_x^{\alpha})^2 + (k_y^{\alpha})^2]. \quad (4.4)$$

Para cada nível j do discreto, temos uma banda j parabólica como mostra a figura 4.1. Portanto, os estados do sistema têm energia dada por

$$\mathcal{E}^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)} + \mathcal{E}_{\parallel}^{\alpha} = \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)} + \frac{\hbar^2(k_{\parallel}^{\alpha})^2}{2m^{*\alpha}}, \quad (4.5)$$

de forma que

$$(k_{\parallel}^{\alpha})^2 = \frac{2m^{*\alpha}}{\hbar^2}(\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}). \quad (4.6)$$

De acordo com (2.30) e (2.31), a área ocupada por um estado em um espaço k bidimensional é igual a $\frac{4\pi^2}{L_x L_y} = \frac{4\pi^2}{S}$ (L_x e L_y são as dimensões do dispositivo nas direções x e y respectivamente). O número de estados em um círculo de raio k_{\parallel}^{α} no espaço recíproco é

$$n_{\mathcal{E}}^{\alpha} = \pi(k_{\parallel}^{\alpha})^2 \frac{S}{4\pi^2} \quad (4.7)$$

Ao combinar as equações (4.6) e (4.7), posso escrever o número de estados com os quais cada banda j contribui para o sistema:

$$n_{\mathcal{E}_j}^{\alpha} = \frac{Sm^{*\alpha}}{2\pi\hbar^2}(\mathcal{E}^{\sigma\alpha} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}). \quad (4.8)$$

A partir de (4.8), obtenho a contribuição à densidade de estados de cada banda j :

$$D_j^{\alpha} = \frac{\partial n_{\mathcal{E}_j}^{\alpha}}{\partial \mathcal{E}_{\parallel}^{\alpha}} = \frac{\partial n_{\mathcal{E}_j}^{\alpha}}{\partial k_{\parallel}^{\alpha}} \frac{\partial k_{\parallel}^{\alpha}}{\partial \mathcal{E}_{\parallel}^{\alpha}}. \quad (4.9)$$

Além disto,

$$\frac{\partial n_{\mathcal{E}_j}^{\alpha}}{\partial k_{\parallel}^{\alpha}} = \frac{\partial}{\partial k_{\parallel}^{\alpha}} \left(\frac{S(k_{\parallel}^{\alpha})^2}{4\pi} \right) = \frac{Sk_{\parallel}^{\alpha}}{2\pi} \quad (4.10)$$

e

$$\frac{dk_{\parallel}^{\alpha}}{d\mathcal{E}_{\parallel}^{\alpha}} = \frac{1}{\frac{d\mathcal{E}_{\parallel}^{\alpha}}{dk_{\parallel}^{\alpha}}} = \frac{m^{*\alpha}}{\hbar^2 k_{\parallel}^{\alpha}}. \quad (4.11)$$

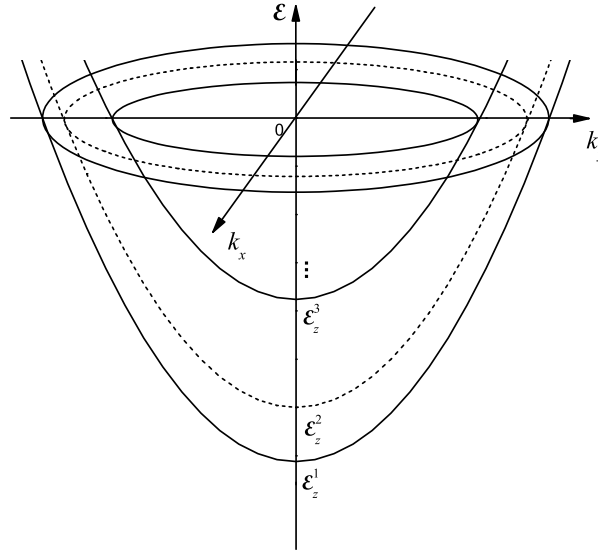


Figura 4.1: Energia cinética do sistema em que cada parabolóide representa uma banda de energia associada a um nível do poço.

Ao combinar (4.9), (4.10) e (4.11) obtenho

$$D_j^{\alpha} = \frac{Sm^{*\alpha}}{2\pi\hbar^2}. \quad (4.12)$$

Cada $D_j^{\alpha}(\mathcal{E})$ é constante e pode ser representada como uma função degrau pois cada banda j somente contribuirá para a densidade de estados quando $\mathcal{E} > \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}$ (ver a figura 4.2). Reescrevo a densidade de estados

$$D_j^{\alpha}(\mathcal{E}) = \frac{Sm^{*\alpha}}{2\pi\hbar^2} \Theta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}), \quad (4.13)$$

onde $\Theta(x)$ é a função degrau de Heaviside, de forma que a densidade de estados total pode ser representada como a figura 4.2 e pode ser escrita de seguinte forma:

$$D(\mathcal{E}) = \sum_{j(\sigma\alpha)} \frac{Sm^{*\alpha}}{2\pi\hbar^2} \Theta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}). \quad (4.14)$$

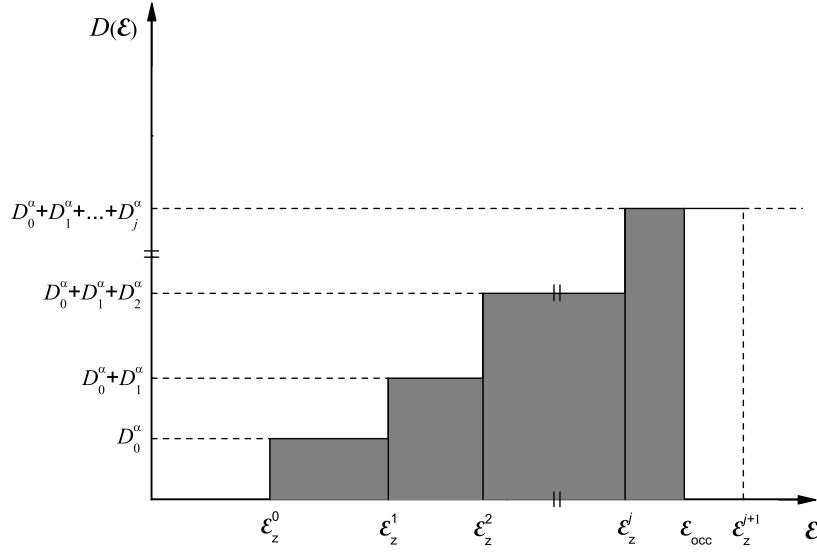


Figura 4.2: Densidade de estados total.

Ao integrar $D(\mathcal{E})$ sobre todos os estados ocupados, obtenho o número de buracos do sistema:

$$\int_{-\infty}^{\mathcal{E}_{occ}} D(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = N^H, \quad (4.15)$$

onde \mathcal{E}_{occ} é a energia de ocupação da região de espalhamento. Defino esta energia de ocupação ao invés de uma energia de Fermi no interior da dupla barreira por termos um sistema submetido à uma diferença de potencial e portanto fora de equilíbrio termodinâmico. O número de buracos com energia menor que \mathcal{E} é definido como

$$n(\mathcal{E}) = \int_{-\infty}^{\mathcal{E}} D(\mathcal{E}') d\mathcal{E}', \quad (4.16)$$

de forma que

$$n(\mathcal{E}_{occ}) = N^H. \quad (4.17)$$

Além disto, N^H pode ser escrito como

$$N^H = p \ L \ S, \quad (4.18)$$

no qual p é o número de buracos por unidade de volume do poço e L é a largura do poço. Portanto,

$$\int_{\mathcal{E}_z^0}^{\mathcal{E}_{occ}} \sum_{j(\sigma\alpha)} \frac{Sm^{*\alpha}}{2\pi\hbar^2} \Theta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}) d\mathcal{E} = p \quad L \quad S \quad (4.19)$$

ou, escrevendo de outra forma,

$$\frac{1}{2\pi\hbar^2 L} \sum_{j(\sigma\alpha)} m^{*\alpha} \int_{\mathcal{E}_z^0}^{\mathcal{E}_{occ}} \Theta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}) d\mathcal{E} = p. \quad (4.20)$$

Primeiramente, resolvo a integral em (4.20):

$$\int_{\mathcal{E}_z^0}^{\mathcal{E}_{occ}} \Theta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}) d\mathcal{E} = \begin{cases} 0 & , \text{ se } \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)} \geq \mathcal{E}_{occ} \\ \mathcal{E}_{occ} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)} & , \text{ se } \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)} \leq \mathcal{E}_{occ} \end{cases}. \quad (4.21)$$

Portanto, obtenho da equação (4.20)

$$\frac{1}{2\pi\hbar^2 L} \sum_{j(\sigma\alpha)}^{n_{occ}} m^{*\alpha} (\mathcal{E}_{occ} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}) = p \quad (4.22)$$

ou, escrita de outra forma,

$$\sum_{j(\sigma\alpha)}^{n_{occ}} m^{*\alpha} (\mathcal{E}_{occ} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}) = \zeta \quad (4.23)$$

onde $\zeta = 2\pi\hbar^2 pL$ é uma constante conhecida, n_{occ} é o número de níveis do poço com energia menor que \mathcal{E}_{occ} e $\sum_{j(\sigma\alpha)}^{n_{occ}}$ representa a soma sobre todos estes níveis.

A partir da equação (4.23), posso determinar \mathcal{E}_{occ} e o número de estados ocupados. Reescrevo esta equação da seguinte forma:

$$\mathcal{E}_{occ} \sum_{j(\sigma\alpha)}^{n_{occ}} m^{*\alpha} - \sum_{j(\sigma\alpha)}^{n_{occ}} m^{*\alpha} \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)} = \zeta, \quad (4.24)$$

ou

$$\mathcal{E}_{occ} = \frac{\zeta + \sum_{j(\sigma\alpha)}^{n_{occ}} m^{*\alpha} \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}}{\sum_{j(\sigma\alpha)}^{n_{occ}} m^{*\alpha}}. \quad (4.25)$$

Portanto, basta saber o número de níveis ocupados n_{occ} para determinar \mathcal{E}_{occ} . Utilizarei a densidade de estados para melhor ilustrar como obterei o número de ocupação. A partir de (4.16), posso escrever o número de estados com energia menor que \mathcal{E} :

$$n(\mathcal{E}) = \frac{S}{2\pi\hbar^2} \sum_{j(\sigma\alpha)}^< m^{*\alpha}(\mathcal{E} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}) \quad (4.26)$$

no qual $\sum_{j(\sigma\alpha)}^<$ representa a soma para j tal que $\mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)} < \mathcal{E}$. A expressão (4.26) está representada graficamente na figura 4.3. Pela figura vemos novamente que cada banda associada a $\mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}$ contribuirá com um número de estados se $\mathcal{E} > \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}$. Podemos variar \mathcal{E} , levando em consideração o número de estados associados a cada $\mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}$, até que a condição (4.17) seja atendida. Então, estaremos determinando \mathcal{E}_{occ} e n_{occ} . Este processo pode ser feito numericamente de forma simples. O número de estados ocupados total será

$$n(\mathcal{E}_{occ}) = \frac{S}{2\pi\hbar^2} \sum_{j(\sigma\alpha)}^{n_{occ}} m^{*\alpha}(\mathcal{E}_{occ} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}). \quad (4.27)$$

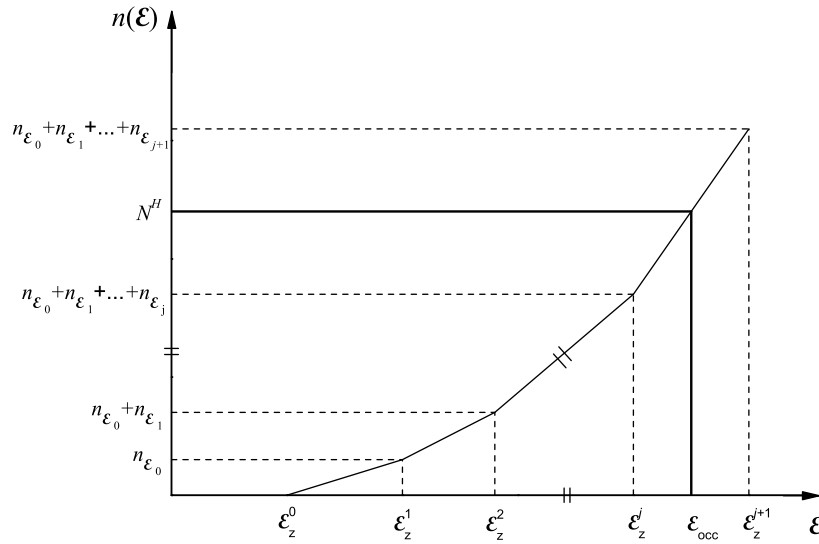


Figura 4.3: Número de estados total.

Ao combinar a equações (4.3) e (4.27), obtenho a carga devido aos buracos do sistema na posição z_i ,

$$q(z_i) = \frac{eS}{2\pi\hbar^2} \sum_{j(\sigma\alpha)}^{n_{occ}} m^{*\alpha}(\mathcal{E}_{occ} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}) |\psi^{j(\sigma\alpha)}(z_i)|^2 \quad (4.28)$$

onde $\psi^{j(\sigma\alpha)}(z_i)$ é a componente z_i da função de onda correspondente à banda de energia associada a $\mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}$. Além disto, a carga encerrada em um plano i do contínuo é dada por:

$$q(z_i) = \sigma(z_i)S \quad (4.29)$$

onde $\sigma(z_i)$ é a quantidade de carga por área perpendicular à direção z . Portanto,

$$\sigma(z_i) = \frac{e}{2\pi\hbar^2} \sum_{j(\sigma\alpha)}^{n_{occ}} m^{*\alpha} (\mathcal{E}_{occ} - \mathcal{E}_z^{j(\sigma\alpha)}) |\psi^{j(\sigma\alpha)}(z_i)|^2. \quad (4.30)$$

4.2 Energia potencial do sistema

Após calcular a distribuição de cargas do sistema, posso calcular o seu perfil de potencial e, conseqüentemente, de energia potencial resolvendo uma equação de Poisson unidimensional na direção z :

$$\frac{d^2\phi(z)}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\varepsilon(z)} \quad (4.31)$$

na qual $\rho(z)$ é a densidade volumétrica de cargas. A permissividade $\varepsilon(z)$ é uma função de z , pois, no nosso modelo, consideramos a diferença entre as permissividades do *GaAs* e do *AlAs*. O potencial e a distribuição de cargas são funções discretizadas, portanto $\phi(z) = \phi(z_j)$, $\rho(z) = \rho(z_j)$. Escrevo também $\varepsilon(z) = \varepsilon(z_j)$, onde $z_j = ja$. Além disto, no nosso modelo, $\rho(z_j)$ é definido como

$$\rho(z_j) = \sigma(z_j)/a, \quad (4.32)$$

onde a é a distância entre os planos perpendiculares à z . Utilizarei, desta forma, a aproximação da segunda derivada em diferenças finitas escrita na equação (A.28). Posso então escrever que

$$\frac{d^2\phi_j}{dz^2} = \frac{\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}}{a^2} = -\frac{\sigma_j}{a\varepsilon_j} \quad (4.33)$$

ou

$$\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1} = -\frac{a}{\varepsilon_j} \sigma_j \quad (4.34)$$

onde utilizei as abreviações $\phi(z_j) = \phi_j$, $\sigma(z_j) = \sigma_j$ e $\varepsilon(z_j) = \varepsilon_j$.

É importante mencionar que este potencial calculado pela solução da equação de Poisson não inclui o potencial das barreiras nas camadas de *AlAs*, o “splitting” da banda no poço magnético nem a diferença de potencial aplicada no dispositivo. Estes fatores são adicionados ao potencial calculado, e a energia potencial associada ao potencial completo é utilizada no hamiltoniano. Como mencionado anteriormente, consideramos no nosso dispositivo que a dopagem de *Mn* é uniforme e restrita ao interior do poço. De forma

diferente, os buracos não estão restritos ao poço, portanto podem escapar da dupla barreira. Apesar disto, se os buracos escaparem da dupla barreira, no seu interior haverá uma quantidade líquida de carga negativa. A carga negativa acumulada no poço atrairá os buracos de forma que estes não se afastarão da região da dupla barreira. Então, podemos afirmar que a distribuição de buracos no dispositivo está restrita a uma região em torno da dupla barreira e que fora desta região, por não haver buracos, teremos um perfil de potencial linear. A partir desta afirmação, podemos desenvolver um método de cálculo do potencial de forma a impor a linearidade do seu perfil na região sem cargas e restringir o cálculo da contribuição da distribuição de cargas ao potencial à região carregada. Esta região pode ser determinada realizando o cálculo autoconsistente de carga e energia potencial uma única vez para todo o sistema. Os coeficientes linear e angular das retas que formam o perfil de potencial da região sem carga são ajustados pelo próprio processo autoconsistente.

4.2.1 Método de cálculo da energia potencial

Primeiramente, reescrevo a equação (4.34) da seguinte forma:

$$\phi_{(l)j-1} - 2\phi_{(l)j} + \phi_{(l)j+1} = -\frac{a}{\varepsilon_j}\sigma_j. \quad (4.35)$$

O índice l representa um dos três setores mostrados na figura 4.4 que fazem parte da região de espalhamento. O setor $l = 2$ contém toda a distribuição de cargas positivas geradas pela dopagem de Mn . A equação de Poisson é uma equação diferencial não-homogênea cuja solução pode ser encontrada através da soma da sua solução homogênea a uma solução particular. Podemos escrever o potencial de cada plano j do sistema da seguinte forma:

$$\phi_{(l)j} = \varphi_{(l)j} + r_{(l)j} \quad , \quad l = 1, 2, 3. \quad (4.36)$$

onde

$$r_{(l)j} = A_l j a + B_l \quad (4.37)$$

representa uma solução homogênea ao potencial, pois

$$r_{(l)j-1} - 2r_{(l)j} + r_{(l)j+1} = 0. \quad (4.38)$$

As constantes A_l e B_l são respectivamente os coeficientes angular e linear das retas que representam a solução homogênea do potencial nas três regiões mencionadas anteriormente. $\varphi_{(l)j}$ é uma solução particular do potencial na região l e no plano j .

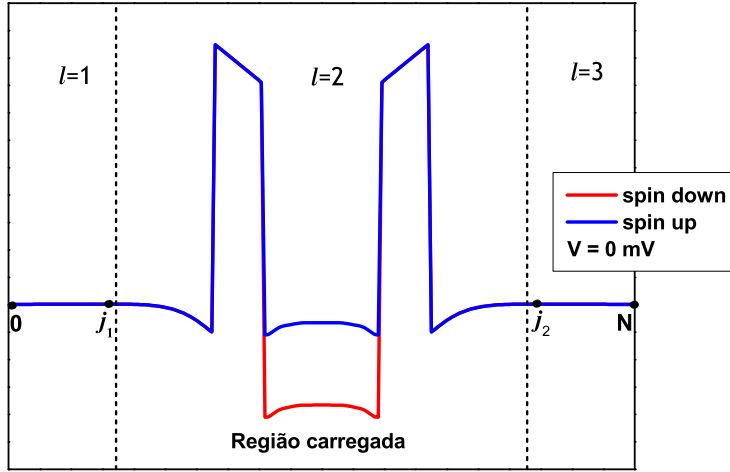


Figura 4.4: Perfil de energia potencial para $V = 0$ mV. Este diagrama mostra os setores $l = 1, 2, 3$ da região de espalhamento. O setor $l = 2$ contém toda a distribuição de cargas positivas geradas pela dopagem de Mn . Os pontos j_1 e j_2 representam respectivamente o último plano da região 1 e o primeiro plano da região 3.

4.2.2 Solução particular da equação de Poisson

Nesta seção, mostraremos como obter uma solução particular para o perfil de potencial. Em primeiro lugar, escrevo a equação (4.34) para o potencial φ_j :

$$\varphi_{j-1} - 2\varphi_j + \varphi_{j+1} = -\frac{a}{\varepsilon_j}\sigma_j. \quad (4.39)$$

Escrevo (4.39), de forma matricial,

$$\begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \ddots & -2 & 1 & 0 & \\ \ddots & 1 & -2 & 1 & \ddots \\ & 0 & 1 & -2 & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_j \\ \vdots \\ \varphi_{N-1} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \frac{a\sigma_1}{\varepsilon_1} \\ \vdots \\ \frac{a\sigma_j}{\varepsilon_j} \\ \vdots \\ \frac{a\sigma_{N-1}}{\varepsilon_{N-1}} \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

ou, resumidamente,

$$M\varphi = -\sigma' \quad (4.41)$$

onde

$$\sigma' = \begin{pmatrix} \frac{a\sigma_1}{\varepsilon_1} \\ \vdots \\ \frac{a\sigma_j}{\varepsilon_j} \\ \vdots \\ \frac{a\sigma_{N-1}}{\varepsilon_{N-1}} \end{pmatrix}. \quad (4.42)$$

O potencial φ_j deve também satisfazer condições de contorno homogêneas:

$$\varphi_0 = \varphi_N = 0. \quad (4.43)$$

Se multiplicarmos (4.41) pela inversa da matriz M obtemos

$$M^{-1}M\varphi = -M^{-1}\sigma' \quad (4.44)$$

ou

$$\varphi = G\sigma', \quad (4.45)$$

onde

$$G = -M^{-1}. \quad (4.46)$$

G é uma função de Green que pode ser representada pela figura 4.5 e deve satisfazer as seguintes condições:

$$G_{0j} = 0 \quad (4.47)$$

$$G_{N+1j} = 0 \quad (4.48)$$

$$G_{i-1j} - 2G_{ij} + G_{i+1j} = -\delta_{ij}. \quad (4.49)$$

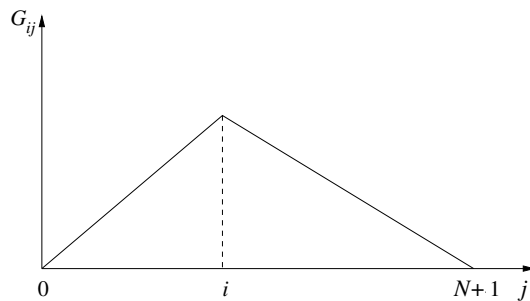


Figura 4.5: A função de Green G_{ij} para um i fixo.

Proponho a solução

$$G_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{N+1}i(N+1-j) & \text{se } i \leq j \\ \frac{1}{N+1}j(N+1-i) & \text{se } i \geq j \end{cases} \quad (4.50)$$

que satisfaz perfeitamente as condeções (4.47), (4.48) e (4.49). Vemos que esta função de Green, a menos do termo $\frac{1}{N+1}$, constitui-se de um conjunto de números inteiros o que é surpreendente. Portanto, a solução da equação de (4.45) é dada por:

$$\varphi_i = \frac{a}{N+1} \left[\sum_{j \leq i} j(N+1-i) \frac{\sigma_j}{\varepsilon_j} + \sum_{j > i} i(N+1-j) \frac{\sigma_j}{\varepsilon_j} \right]. \quad (4.51)$$

4.2.3 Solução homogênea da equação de Poisson

Como as regiões 1 e 3 não possuem cargas, $\varphi_{(1)j} = \varphi_{(3)j} = 0$. Assim, obtenho de (4.36) o seguinte conjunto de equações:

$$\phi_{(1)j} = A_1ja + B_1 \quad (4.52)$$

$$\phi_{(2)j} = \varphi_j + A_2ja + B_2 \quad (4.53)$$

$$\phi_{(3)j} = A_3ja + B_3 \quad (4.54)$$

no qual, pelo fato de apenas $\varphi_{(2)j} \neq 0$, escrevi $\varphi_{(2)j} = \varphi_j$. Para obter a solução destas 3 equações preciso determinar o valor das 6 incógnitas: $A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3$. O perfil de potencial fora da região de espalhamento é uniforme e nulo. Para que haja continuidade do potencial, a equação (4.52) para $z_j = 0$ me fornece,

$$\phi_{(1)0}(0) = B_1 = 0. \quad (4.55)$$

Falta-me determinar 5 incógnitas. Determinar-las-ei a partir de um sistema de 5 equações escrevendo (4.35) para $j = j_1, j_1 + 1, j_2 - 1, j_2$ e N . Como mostrado na figura 4.4, j_1 e j_2 representam respectivamente o último plano da região 1 e o primeiro plano da região 3.

Para $j = j_1$ temos

$$\phi_{(1)j_1-1} - 2\phi_{(1)j_1} + \phi_{(2)j_1+1} = 0. \quad (4.56)$$

Substituirei agora as equações (4.52) e (4.53) na anterior. Obtenho, assim,

$$A_1(j_1 + 1)a - A_2(j_1 + 1)a - B_2 = \varphi_{j_1+1}. \quad (4.57)$$

Para $j = j_1 + 1$ temos

$$\phi_{(1)j_1} - 2\phi_{(2)j_1+1} + \phi_{(2)j_1+2} = -\frac{a}{\varepsilon_{j_1+1}}\sigma_{j_1+1}. \quad (4.58)$$

No plano $j = j_1 + 1$, temos *GaAs*. Portanto, abreviarei ε_{j_1+1} como ε_G . Substituindo (4.52) e (4.53) na (4.58) obtemos

$$A_1j_1a - A_2j_1a - B_2 = 2\varphi_{j_1+1} - \varphi_{j_1+2} - \frac{a}{\varepsilon_G}\sigma_{j_1+1}. \quad (4.59)$$

Para $j = j_2 - 1$ temos

$$\phi_{(2)j_2-2} - 2\phi_{(2)j_2-1} + \phi_{(3)j_2} = -\frac{a}{\varepsilon_{j_2-1}}\sigma_{j_2-1}. \quad (4.60)$$

No plano $j = j_2 - 1$, também temos *GaAs* portanto abreviarei ε_{j_2-1} como ε_G . Ao substituir (4.53) e (4.54) na (4.60) obtenho

$$-A_2j_2a + -B_2 + A_3j_2a + B_3 = -\varphi_{j_2-2} + 2\varphi_{j_2-1} - \frac{a}{\varepsilon_G}\sigma_{j_2-1}. \quad (4.61)$$

Para $j = j_2$ temos

$$\phi_{(2)j_2-1} - 2\phi_{(3)j_2} + \phi_{(3)j_2+1} = 0. \quad (4.62)$$

Substituo (4.53) e (4.54) em (4.62) para obter

$$A_2(j_2 - 1)a + B_2 - A_3(j_2 - 1)a - B_3 = -\varphi_{j_2-1}. \quad (4.63)$$

Finalmente, para $j = N$ temos

$$\phi_{(3)N} = 0. \quad (4.64)$$

Substituo (4.54) em (4.64) para obter

$$A_3Na + B_3 = 0. \quad (4.65)$$

As equações (4.57), (4.59), (4.61), (4.63) e (4.65) me fornecem o sistema de 5 equações com 5 incógnitas que posso escrever de forma matricial:

$$\begin{pmatrix} (j_1 + 1)a & -(j_1 + 1)a & -1 & 0 & 0 \\ j_1a & -j_1a & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -j_2a & -1 & j_2a & 1 \\ 0 & (j_2 - 1)a & 1 & -(j_2 - 1)a & -1 \\ 0 & 0 & 0 & Na & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ B_2 \\ A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.66)$$

onde

$$\Phi_1 = \varphi_{j_1+1} \quad (4.67)$$

$$\Phi_2 = 2\varphi_{j_1+1} - \varphi_{j_1+2} - \frac{a}{\varepsilon_G} \sigma_{j_1+1} \quad (4.68)$$

$$\Phi_3 = -\varphi_{j_2-2} + 2\varphi_{j_2-1} - \frac{a}{\varepsilon_G} \sigma_{j_2-1} \quad (4.69)$$

$$\Phi_4 = -\varphi_{j_2-1}. \quad (4.70)$$

A solução do sistema (4.66) me fornece

$$B_2 = j_1 \Phi_1 - (j_1 + 1) \Phi_2 \quad (4.71)$$

$$B_3 = B_2 - (j_2 - 1) \Phi_3 - j_2 \Phi_4 \quad (4.72)$$

$$A_3 = -\frac{B_3}{Na} \quad (4.73)$$

$$A_2 = A_3 - \frac{1}{j_2 a} (\Phi_3 + B_2 - B_3) \quad (4.74)$$

$$A_1 = A_2 - \frac{1}{(j_1 + 1)a} (\Phi_1 + B_2). \quad (4.75)$$

Desta forma, tendo calculado os coeficientes acima, posso escrever a solução das equações (4.52), (4.53) e (4.54) que me fornecem o potencial nas três regiões da região de espalhamento.

Capítulo 5

Resultados e conclusões

Até este ponto, a dissertação consistiu na apresentação das bases teóricas e experimentais e do formalismo matemático que sustentam este projeto. Neste capítulo, divulgarei nossos resultados e farei algumas discussões sobre os mesmos.

5.1 Distribuição de cargas e perfil de energia potencial

Primeiramente, reportarei a distribuição de carga autoconsistente e a diferença $\Delta\sigma(z)$ entre uma distribuição de cargas e outra com voltagem 0,1 mV menor. Além disto, mostrarei a distribuição de buracos por massa efetiva e por spin. Em segundo lugar, reportarei o perfil de energia potencial obtido autoconsistentemente e a diferença $\Delta U(z)$ entre um perfil de energia potencial e outro com voltagem 0,1 mV menor. Junto com o perfil de energia potencial, mostrarei e discutirei a distribuição de níveis de energia do poço formado pela dupla barreira levando em consideração massa efetiva e spin.

5.1.1 Distribuição de cargas

Após obter a solução autoconsistente da distribuição de cargas, mostro nas figuras 5.1 e 5.2 as distribuições de cargas para $V = 0$ mV e para $V = 92$ mV respectivamente. Vemos que os portadores se concentram na região interna da dupla barreira sem variação significativa entre $V = 0$ mV e $V = 125$ mV, o que mostra que os buracos escapam pouco da dupla barreira como foi mencionado na seção 4.2. A figura 5.3 contém o gráfico de $\Delta\sigma(z)$ para $V = 92$ mV. Podemos ver nas figuras 5.1 e 5.2 um aspecto muito interessante que verificamos neste trabalho, a distribuição de cargas se altera minimamente devida a aplicação de uma diferença de potencial. Apesar da variação ser pequena ela existe,

e através de $\Delta\sigma(z)$ podemos ter uma noção de como a distribuição de cargas se altera. Vemos na figura 5.3 que, após uma pequena variação de V , há uma pequena variação positiva da acumulação dos buracos à direita da primeira barreira e uma variação negativa bem mais significativa da acumulação de buracos à esquerda da primeira barreira.

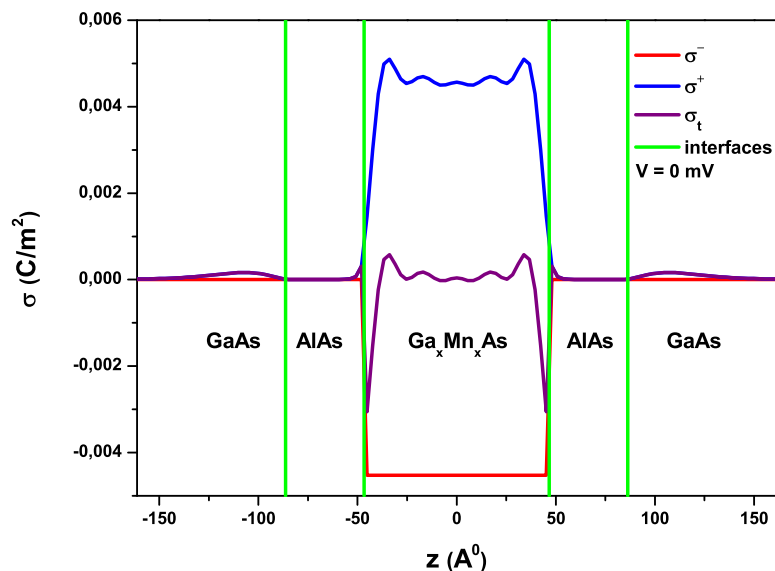


Figura 5.1: Distribuição de cargas para $V = 0$ mV.

Além da distribuição de cargas geral, realizamos também alguns cálculos para analisar a distribuição de portadores por spin e por massa efetiva. As figuras 5.4 e 5.5 mostram as distribuições de buracos por massa efetiva e por spin respectivamente. Destes cálculos obtivemos as concentrações percentuais de portadores em termos de região, massa efetiva e spin. Estes dados estão divulgados na tabela 5.1. Podemos ver que aproximadamente 96 % dos buracos é de HH, ou seja, eles contribuem majoritariamente para a neutralidade de cargas. A tabela 5.2 mostra as concentrações percentuais de portadores em termos de massa efetiva e spin no interior da dupla barreira. Nesta tabela, vemos primeiramente que aproximadamente 93 % dos portadores da região interna têm spin down. Vemos também que aproximadamente 96 % dos buracos interiores são HH. Estes resultados concordam qualitativamente com alguns trabalhos feitos em sistemas de multicamadas [34, 39].

5.1.2 Perfil de energia potencial

As figuras 5.6 e 5.7 contêm os gráficos do perfil de energia potencial para $V = 0$ mV e para $V = 92$ mV, respectivamente, em escalas diferentes. Para diferença de potencial

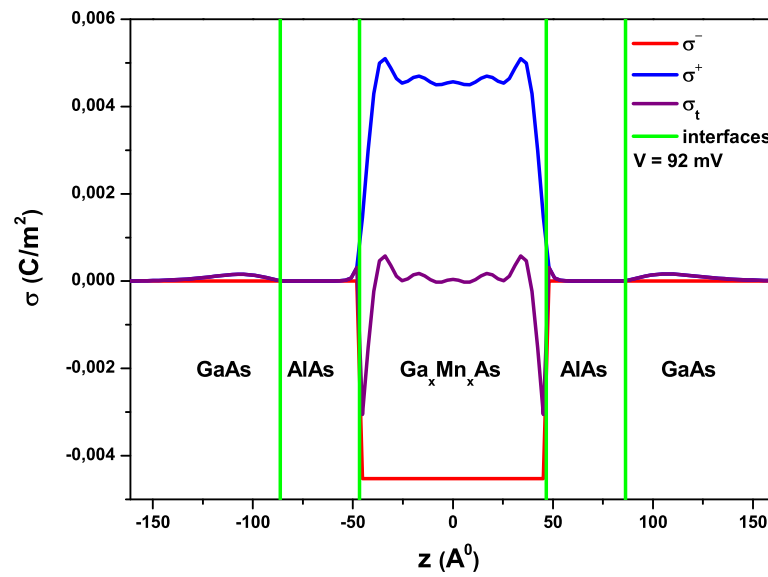


Figura 5.2: Distribuição de cargas para $V = 92 \text{ mV}$.

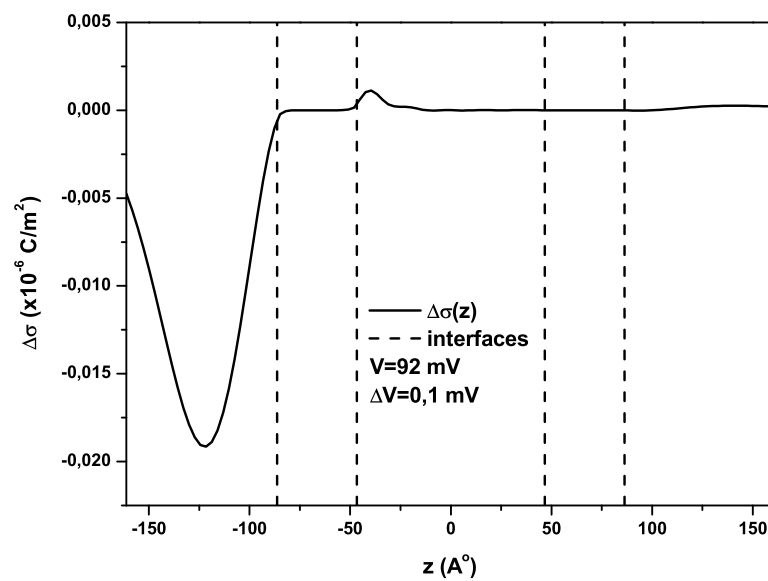


Figura 5.3: $\Delta\sigma(z)$ para $V = 92 \text{ mV}$.

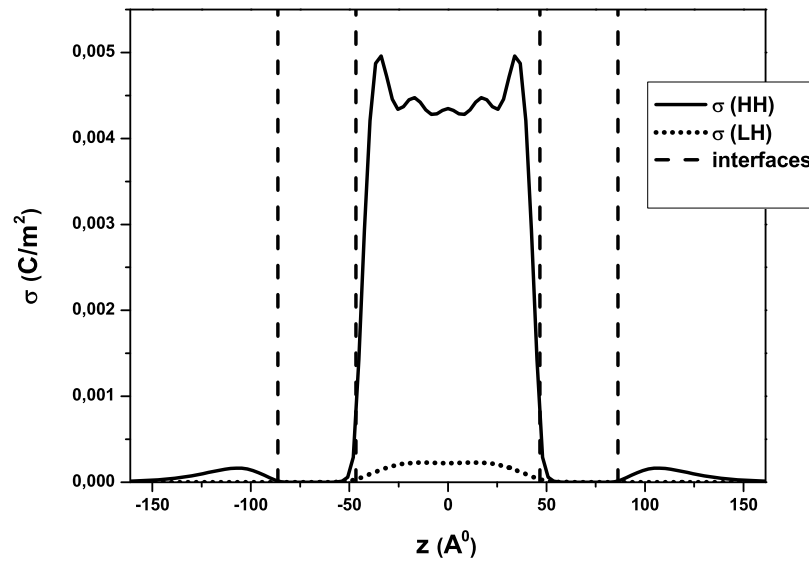


Figura 5.4: Distribuição de cargas em termos de massa efetiva para $V = 0$ mV.

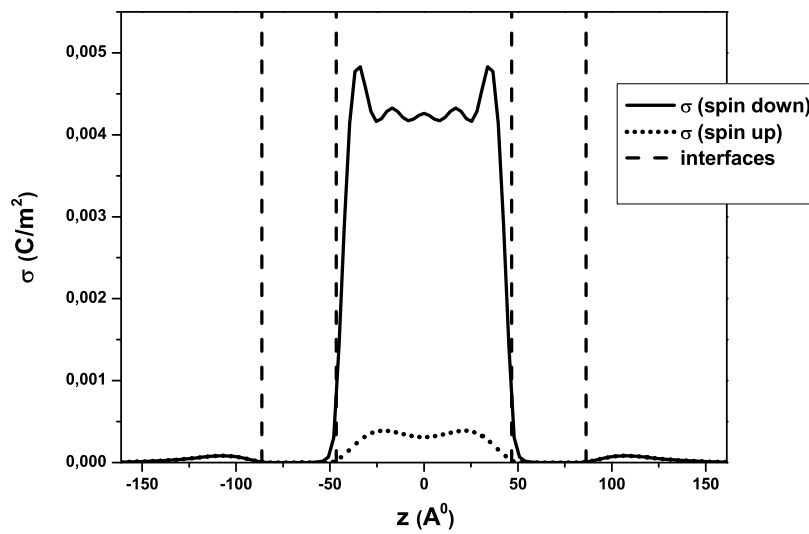


Figura 5.5: Distribuição de cargas em termos de spin para $V = 0$ mV.

	% interna	% externa	% HH	% LH	% ↓	% ↑
$V = 0$ mV	97,04	2,96	95,98	4,02	92,00	8,00
$V = 125$ mV	97,28	2,72	95,97	4,03	92,13	7,87

Tabela 5.1: Esta tabela contém a porcentagem da carga de buracos total no interior da dupla barreira (% interna), assim como, no seu exterior (% externa). Além disto, a tabela mostra as porcentagens de carga de HH (% HH), LH (% LH), buracos spin down (% ↓) e buracos spin up (% ↑).

	% HH	% LH	% ↓	% ↑
$V = 0$ mV	95,86	4,14	93,28	6,72
$V = 125$ mV	95,86	4,14	93,31	6,69

Tabela 5.2: Esta tabela contém, para buracos da região interna da dupla barreira as porcentagens de carga de HH (% HH), LH (% LH), buracos spin down (% ↓) e buracos spin up (% ↑).

nula são mostrados os 10 níveis ocupados do poço mais alguns outros níveis importantes para as discussões que se seguem. A figura 5.8 mostra $\Delta U(z)$ para $V = 92$ mV. A tabela 5.3 mostra os níveis, suas energias, seus spins e suas massas efetivas correspondentes para $V = 0$ mV.

Podemos ver o “band bending” causado pela interação entre os portadores e determinado pelo cálculo autoconsistente. Ao observar a figura 5.6, verificamos a presença de alguns níveis nas camadas de inversão junto às barreiras. Eles representam o quadrupletto de HH com energia $-5,90$ meV destacado em negrito na tabela 5.3. Estes não produzem corrente no dispositivo, pois têm energia sempre abaixo de 0 meV, ou seja, não são níveis ressonantes acessíveis para os buracos incidentes à dupla barreira. Os níveis indicados por um asterisco são os níveis ocupados do poço (níveis com energia $\mathcal{E}^{\sigma\alpha} < \mathcal{E}_{occ}$). Podemos observar que dos 10 níveis ocupados 7 são “spin down”. Além disto, vemos que 7 destes 10 são HH. Estes resultados concordam com as figuras 5.4 e 5.5 e com a tabela 5.2 em relação à distribuição dos buracos na dupla barreira em termos de spin e massa efetiva, o que reforça os nossos resultados.

Podemos verificar na figura 5.8, que para um perfil de energia potencial, a queda de potencial atribuída à V ocorre na região anterior à dupla barreira, ou seja, a energia potencial do centro do poço varia aproximadamente da mesma forma que a energia potencial do coletor. Esta propriedade, particular à dupla barreira mostrada na figura 5.6, foi observada para valores de V de 0 a 140 mV. Para uma dupla barreira com um poço de 100 Å e barreiras de 20 Å de largura, estudada anteriormente, foi observado que o perfil de potencial não variava sempre conforme a figura 5.8. Esta dupla barreira mostrava dois regimes diferentes para a evolução do perfil de energia potencial, um para $V > V_r$ conforme a figura 5.8 e outro para $V < V_r$ conforme a figura 5.9. V_r é a diferença de potencial na qual há a mudança de regime. Para este caso obtivemos $V_r = 22,2$ mV.

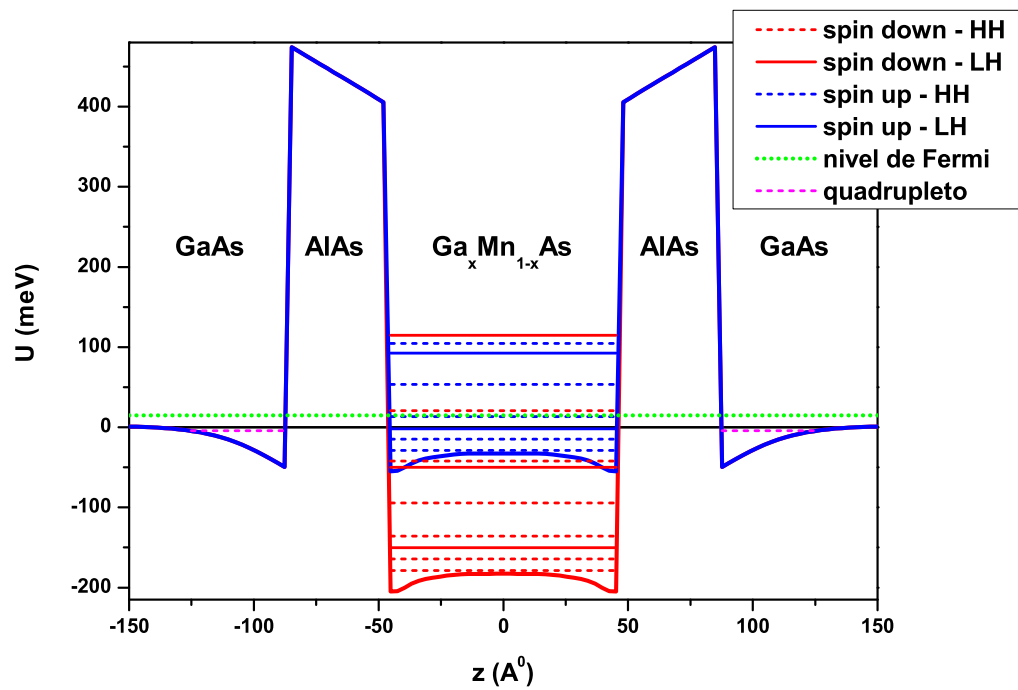


Figura 5.6: O perfil de energia potencial com os níveis de energia da região de espalhamento para $V = 0$ mV.

Nível	Energia (meV)	Spin	Massa efetiva
1*	-180,58	↓	HH
2*	-165,84	↓	HH
3*	-151,83	↓	LH
4*	-137,36	↓	HH
5*	-96,32	↓	HH
6*	-51,80	↓	LH
7*	-44,01	↓	HH
8*	-30,77	↑	HH
9*	-16,45	↑	HH
1	-5,90	↓	HH
2	-5,90	↑	HH
3	-5,90	↓	HH
4	-5,90	↑	HH
10*	-3,64	↑	LH
11	11,45	↑	HH
12	19,12	↓	HH
13	51,67	↑	HH
14	90,88	↑	LH
15	92,43	↓	HH
16	102,85	↑	HH
17	113,36	↓	LH

Tabela 5.3: Níveis da região de espalhamento para $V = 0$ mV. Os níveis em negrito pertencem às camadas de inversão. Os asteriscos indicam os estados ocupados do poço.

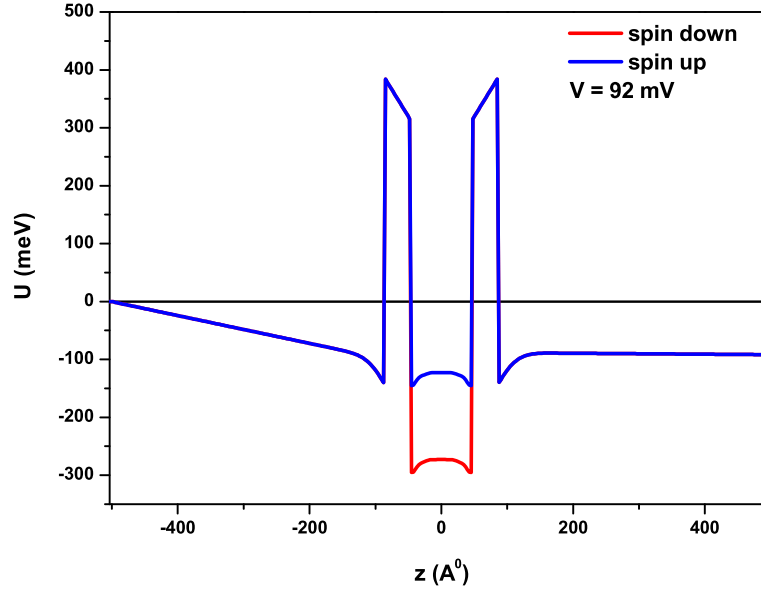


Figura 5.7: O perfil de energia potencial para $V = 92$ mV.

A figura 5.9 mostra que a energia potencial no centro do poço varia aproximadamente metade da energia potencial do coletor, e este era o resultado que esperávamos observar. Descobrimos que o regime de evolução depende da relação entre a energia de ocupação \mathcal{E}_{occ} da região de espalhamento e a energia de Fermi \mathcal{E}_{F_c} do coletor. \mathcal{E}_{occ} é determinada pela equação (4.25) e pode ser observada diagramaticamente nas figuras 4.2 e 4.3. Na ausência de V , para a dupla barreira com poço de 100 \AA observamos que $\mathcal{E}_{occ} < \mathcal{E}_{F_c}$. Conforme aumentávamos V , \mathcal{E}_{F_c} diminuía e a energia potencial na região de espalhamento variava conforme a figura 5.9, até \mathcal{E}_{occ} e \mathcal{E}_{F_c} se alinharem ($V = V_r$). Havia então uma mudança de regime e, se continuássemos a aumentar V , \mathcal{E}_{occ} e \mathcal{E}_{F_c} permaneciam alinhadas com a energia potencial na região de espalhamento variando conforme a figura 5.8. A mudança de regime ocorria pois nós impomos a neutralidade de cargas no dispositivo. Portanto, se \mathcal{E}_{F_c} ficasse abaixo de \mathcal{E}_{occ} , os buracos da região de espalhamento escapariam gerando uma quantidade líquida de cargas negativa nesta região. Na dupla barreira com poço de 93 \AA e barreiras de 40 \AA , o maior confinamento dos buracos gerava um aumento de \mathcal{E}_{occ} , de forma que esta estava alinhada a \mathcal{E}_{F_c} mesmo para $V = 0$ mV. Desta forma, a variação da energia potencial da região de espalhamento ocorria sempre conforme o regime representado pela figura 5.8.

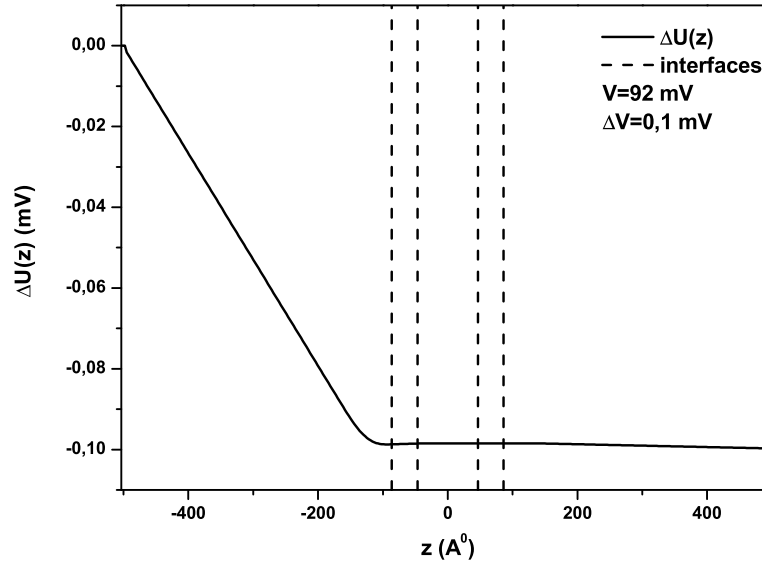


Figura 5.8: $\Delta U(z)$ para $V = 92$ mV em uma dupla barreira com largura do poço igual a 93 \AA e largura das barreiras igual a 40 \AA .

5.2 Correntes polarizadas por spin

Como foi mencionado na introdução, o objetivo deste projeto é desenvolver um modelo de um dispositivo que crie correntes de buracos polarizadas por spin. Ao aplicarmos uma diferença de potencial variável no nosso dispositivo, obtivemos a corrente em função de V mostrada na figura 5.10. O primeiro aspecto a se discutir nesta figura é o fato de não observarmos correntes de HH. Isto ocorre porque estas correntes são desprezíveis quando comparadas às correntes de LH. Analisamos dois picos de transmitância com energias próximas, sendo um de HH e outro de LH. A figura 5.11 mostra um pico de transmitância para um HH e a figura 5.12 para um LH. Medimos as larguras desses picos e calculamos a razão \mathcal{R}_{hl} entre a largura para HH e a largura para LH. Obtivemos $\mathcal{R}_{hl} = 0,8 \times 10^{-5}$. A intensidade da corrente de portadores é proporcional à área sob a curva $T^{\sigma\alpha}$ em função da energia. Portanto, \mathcal{R}_{hl} é uma medida bem precisa da razão entre os máximos de intensidade das correntes de HH e LH. Este resultado é reforçado pela figura 5.13. Devido aos valores de transmitância observados utilizaremos um gráfico $\ln(T^{\sigma\alpha})$, que nos permitirá analisar o transporte de HH e LH juntamente. Vemos na figura 5.13 que os picos nas curvas correspondentes a LH decaem muito menos que os picos nas curvas correspondentes a HH após uma variação da energia. Assim, fica claro a razão de termos correntes de HH desprezíveis em comparação às correntes de LH.

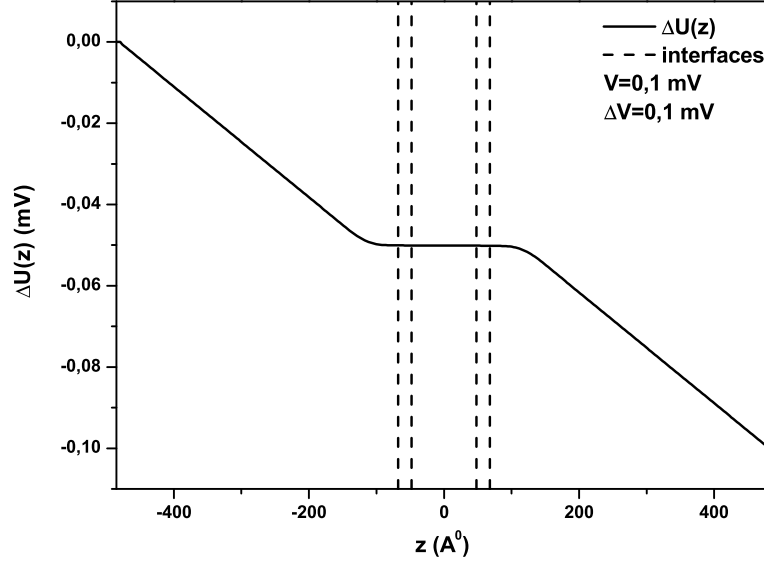


Figura 5.9: $\Delta U(z)$ para $V = 0,1$ mV em uma dupla barreira com largura do poço igual a 100 \AA e largura das barreiras igual a 20 \AA .

Podemos entender fisicamente o resultado acima, estimando e comparando os graus de confinamento de HH e LH. O comprimento de penetração $\lambda^{\sigma\alpha}$, de um buraco com energia $\mathcal{E}^{\sigma\alpha}$ em uma barreira, é dado por

$$\lambda^{\sigma\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m^{*\alpha}[U_b - \mathcal{E}^{\sigma\alpha}]}} \quad (5.1)$$

no qual, U_b é a altura da barreira. Portanto, a razão entre os comprimentos de penetração de dois buracos, com mesma energia $\mathcal{E}^{\sigma\alpha}$ e massas efetivas m^{*l} (LH) e m^{*h} (HH), é

$$\frac{\lambda^{\sigma h}}{\lambda^{\sigma l}} = \sqrt{\frac{m^{*l}}{m^{*h}}} \approx 0,37. \quad (5.2)$$

Dentro da barreira a função de onda de uma partícula decai, aproximadamente, como uma exponencial do tipo $e^{-z/\lambda^{\sigma\alpha}}$. Isto nos dá uma estimativa do grau de confinamento de um buraco no poço. Portanto, posso avaliar o quanto um HH é mais confinado que um LH. A razão entre os graus de confinamento de HH e LH é dada por

$$C_{hl} = \frac{e^{-\frac{d_b}{\lambda^{\sigma h}}}}{e^{-\frac{d_b}{\lambda^{\sigma l}}}} = e^{-d_b\left(\frac{1}{\lambda^{\sigma h}} - \frac{1}{\lambda^{\sigma l}}\right)} = e^{-d_b\left(\frac{1}{\lambda^{\sigma h}} - \frac{0,37}{\lambda^{\sigma h}}\right)} = \left[e^{-\left(\frac{d_b}{\lambda^{\sigma h}}\right)} \right]^{0,63}, \quad (5.3)$$

na qual $d_b = 40 \text{ \AA}$ é a largura da barreira. Para um HH, com energia $\mathcal{E}^{\sigma\alpha} = 15 \text{ meV}$, o comprimento de penetração é $\lambda^{\sigma h} \approx 3,45 \text{ \AA}$. Portanto

$$C_{hl} = \left[e^{-\left(\frac{40}{3,45}\right)} \right]^{0,63} \approx 6,8 \times 10^{-4}. \quad (5.4)$$

C_{hl} dá uma noção da razão entre as intensidades das correntes de tunelamento de HH e LH. Portanto, esta estimativa super-simplificada mostra que as correntes de HH devem ser desprezíveis em comparação às correntes de LH.

Também verificamos, na figura 5.10, uma superposição desprezível entre correntes de LH up e LH down. Obtemos um altíssimo grau de polarização por spin. Com os dados fornecidos pelas figuras 5.3 e 5.8 pudemos obter um resultado qualitativamente idêntico àquele apresentado na figura 5.10 tendo que realizar o cálculo de autoconsistência apenas para os quatro primeiros valores de V e utilizando distribuição de cargas e de energia potencial extrapolados quadraticamente para outros valores de V . Esperávamos obter um método computacional mais eficiente, porém as técnicas utilizadas anteriormente para torná-lo mais eficiente já haviam otimizado o mesmo de forma que as últimas mudanças não geraram grande efeito.

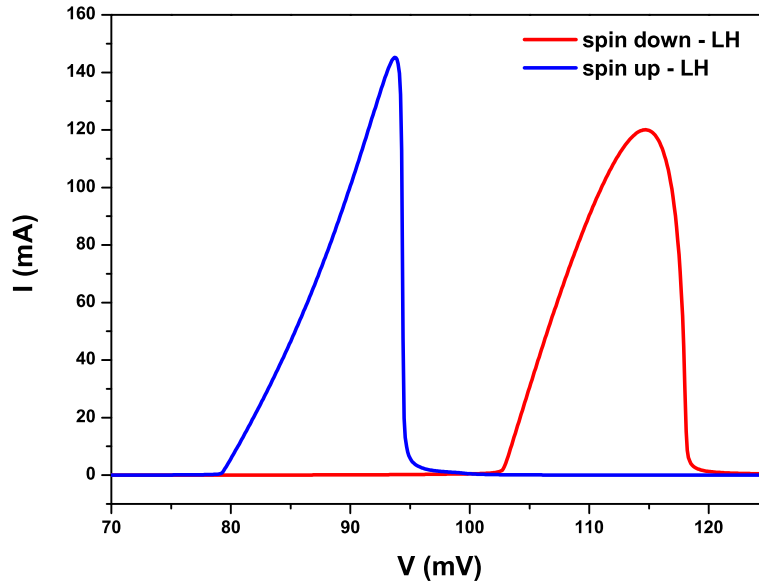


Figura 5.10: Corrente de buracos gerada por uma tensão variável. Vemos correntes de LH polarizadas por spin. Além disto, verificamos que as correntes de HH são desprezíveis em comparação as correntes de LH.

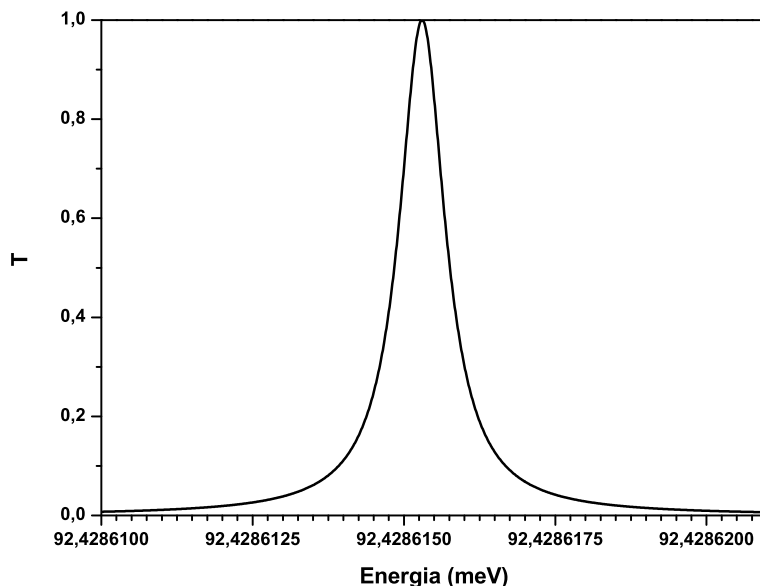


Figura 5.11: Um pico de transmitância de HH para $V = 0$ mV.

5.3 Conclusões

Estudamos um modelo teórico de um diodo de tunelamento ressonante semiconductor de $Ga_{1-x}Mn_xAs/Ga_{1-y}Al_yAs$ submetido a uma diferença de potencial V variável e sem aplicação de campo magnético. O objetivo principal do projeto era construir um dispositivo capaz de gerar correntes polarizadas por spin. O poço formado no dispositivo pela dupla barreira é ferromagnético devido à dopagem de Mn no $GaAs$ que gera uma magnetização média. Como aproximação, consideramos a distribuição de impurezas de Mn uniforme. Esta magnetização, restrita ao interior do poço produz no mesmo um “splitting” da banda de valência e conseqüentemente dos níveis ressonantes. Como resultado disto a corrente de tunelamento estará polarizada.

O sistema foi estudado na aproximação “tight binding” e a interação dos buracos foi calculada na aproximação Hartree. O transporte de buracos se deu no regime de transporte balístico e mais especificamente no regime de tunelamento ressonante. Além disto, o transporte de portadores foi tratado no modelo de dois canais de spin, considerando portadores com spin up e portadores com spin down independentemente. Neste projeto, foi considerada pela primeira vez a importância da banda de buracos leves para este dispositivo. Desta forma, tínhamos de resolver quatro sistemas, que correspondem aos quatro tipos de buracos. A distribuição de cargas e a energia potencial foram calcu-

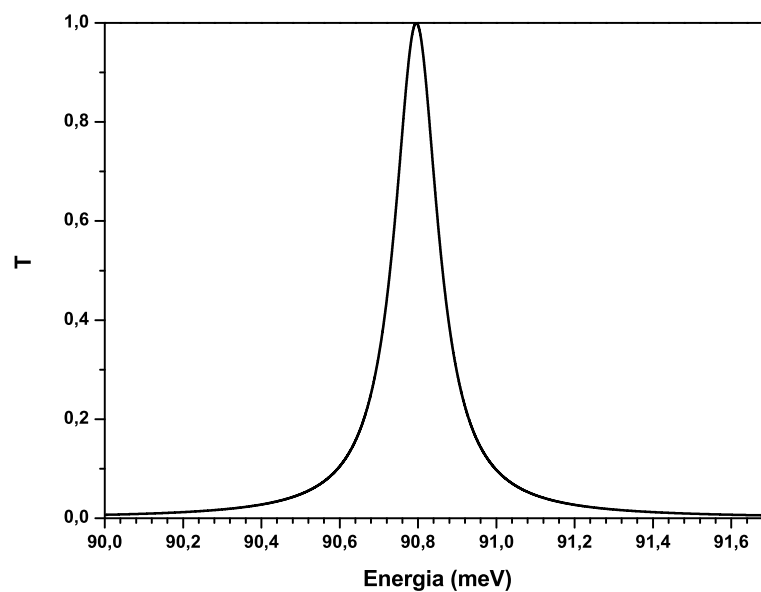


Figura 5.12: Um pico de transmitância de LH para $V = 0$ mV. Podemos ver a diferença de escala deste gráfico em relação ao da figura 5.11. Ao comparar o pico de transmitância de um HH com o pico de um LH, concluímos que a razão entre as larguras destes picos é $0,8 \times 10^{-5}$.

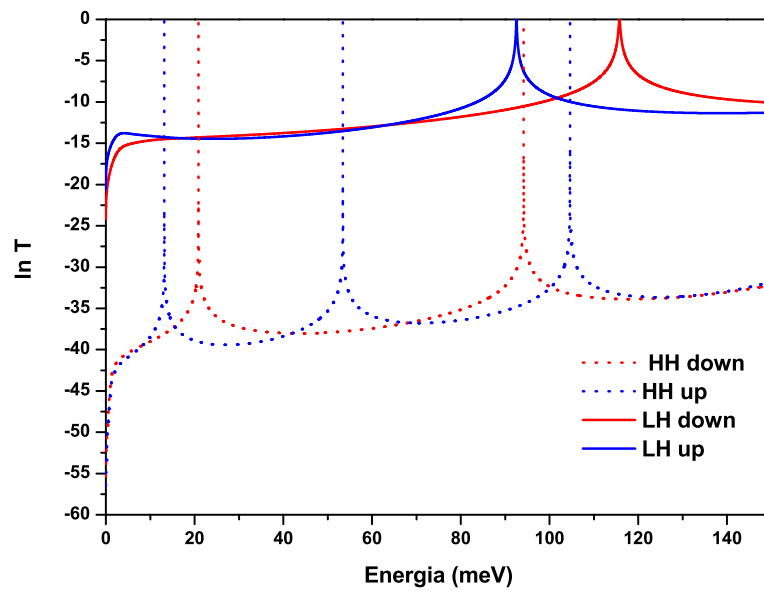


Figura 5.13: Logarítmo da transmitância em função da energia dos buracos, para $V = 0$ mV. São considerados os quatro tipos de portadores do nosso sistema.

ladas autconsistentemente, resolvendo a equação de Schrödinger e a equação de Poisson simultaneamente. Outro elemento novo deste trabalho foi a solução do problema de autoconsistência deste dispositivo inteiramente no espaço real. Anteriormente, este problema tinha sido resolvido no espaço recíproco para simplificar a solução da equação de Poisson [16, 40]. Por outro lado, isto introduzia dificuldades em outras partes do tratamento matemático. Resolvemos este problema, ao utilizar uma função de Green unidimensional para obter a solução da equação de Poisson. De forma surpreendente, a função de Green se mostrou muito simples de se obter e trabalhar no espaço real. Para obter um modelo o mais realístico, também introduzimos a permissividade do dispositivo como uma função dependente do material.

No ponto de vista do cálculo numérico, obter a solução do sistema de equações não-lineares envolvido no problema de autoconsistência foi um grande desafio na realização do nosso projeto. Implementamos inicialmente um algoritmo que utilizava um método de Newton modificado e o perfil de energia potencial como variável de autoconsistência. Este processo se mostrou pouco eficiente, pois a dimensão do sistema era muito grande. O fato de a distribuição de buracos estar restrita a um terço da região de espalhamento, pela atração coulombiana das impurezas, nos incentivou a utilizar a distribuição de cargas como variável de autoconsistência. Obtivemos, assim, um sistema de dimensão menor para a autoconsistência. Apesar de podermos definir distribuição de cargas para um número de sítios menor que o anterior, para o perfil de potencial, o sistema permaneceu com o mesmo tamanho. Pelo fato de termos na região sem carga um perfil de potencial linear, pudemos escrever de forma analítica estas contribuições lineares cujos coeficientes foram ajustados pelo processo de autoconsistência. Também introduzimos um sistema de extrapolações para iniciarmos o cálculo de cada distribuição de cargas e perfil de energia potencial autoconsistentes mais próximos da solução do sistema. Em seguida, tentamos substituir o método de Newton modificado por um método iterativo (método de ponto fixo) para chegar a uma solução mais rapidamente. Porém, devido à grande quantidade de carga acumulada no poço, o simples método iterativo não convergia. Outra tentativa foi utilizar um método quase Newton, que se mostrou o mais eficiente para o nosso sistema. Indo além, combinamos os métodos de Newton modificado e quase Newton de forma a reduzir o tempo computacional a um centésimo do tempo obtido pelo algoritmo inicial.

Para determinar as soluções da equação de Schrödinger, desacoplamos a região de espalhamento do emissor e do coletor. Achemos as soluções destas três regiões separadamente e utilizamos um método de renormalização para reacoplar as regiões exatamente.

A partir da distribuição de cargas, verificamos que os buracos ficam 97 % concentrados no poço, ou seja, não perdemos os portadores que mediam o ferromagnetismo no $Ga_{1-x}Mn_xAs$. Além disto, observamos que 93 % destes portadores da dupla barreira tem spin down, ou seja, têm spin antiparalelo à magnetização média produzida pelas impurezas. Lembremos também que os buracos interagem antiferromagneticamente com as impurezas de Mn e que os buracos com spin down são responsáveis pela sustentação do magnetismo no interior do poço ($Mn_xGa_{1-x}As$). Como obtemos nesta região 93 % de portadores com spin down, o magnetismo é mantido. Na tabela 5.2, vemos também

que aproximadamente 96 % dos buracos interiores são HH. Então os HH são responsáveis pela sustentação do magnetismo e pela neutralidade de carga.

A distribuição de níveis de energia do poço formado pela dupla barreira nos mostra que temos 10 níveis ocupados e que 7 destes têm spin down e 7 são HH o que concorda bem com os resultados apresentados pela distribuição de cargas por spin e por massa efetiva. Além disto, investigando como varia o perfil de energia potencial ao variar V observamos que há uma relação entre a forma de evolução da dupla barreira e a energia de ocupação \mathcal{E}_{occ} . Vimos que, se a energia potencial do coletor estiver acima de \mathcal{E}_{occ} , metade da queda de energia potencial devida a V ocorre à esquerda da dupla barreira e a outra metade à direita. Por outro lado, se a energia potencial do coletor for aproximadamente igual a \mathcal{E}_{occ} , a queda de energia potencial devida a V ocorre completamente à esquerda da dupla barreira.

Finalmente, calculamos a corrente de buracos através do dispositivo na direção perpendicular às interfaces. Observamos que o valor máximo da corrente de HH é 5 ordens de grandeza menor que o mesmo para LH. Isto é evidenciado pela largura dos picos de transmitância dos buracos. Concluimos que esta diferença de intensidade é consequência da diferença entre as massas efetivas dos buracos, que por sua vez, gera um confinamento 5 ordens de grandeza maior para os HH. Para os LH, obtivemos uma superposição desprezível entre correntes de spin up e spin down, o que mostra que temos um polarizador de spin bem eficiente.

Apêndice A

Relações de dispersão

O ponto de partida é a equação de Schrödinger independente do tempo para um sistema tridimensional:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha}}\nabla^2\Psi^{\sigma\alpha}(\mathbf{r}) + U^\sigma(z)\Psi^{\sigma\alpha}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}^{\sigma\alpha}\Psi^{\sigma\alpha}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.1})$$

Em coordenadas cartesianas,

$$\Psi^{\sigma\alpha}(\mathbf{r}) = \Psi^{\sigma\alpha}(x, y, z) \quad (\text{A.2})$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (\text{A.3})$$

Resolverei a equação de Schrödinger por separação de variáveis:

$$\Psi^{\sigma\alpha}(x, y, z) = X^\alpha(x)Y^\alpha(y)Z^{\sigma\alpha}(z) \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) X^\alpha(x)Y^\alpha(y)Z^{\sigma\alpha}(z) + \\ & + U^\sigma(z)X^\alpha(x)Y^\alpha(y)Z^{\sigma\alpha}(z) = \mathcal{E}^{\sigma\alpha}X^\alpha(x)Y^\alpha(y)Z^{\sigma\alpha}(z) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha}} \left(Y^\alpha Z^{\sigma\alpha} \frac{d^2 X^\alpha}{dx^2} + X^\alpha Z^{\sigma\alpha} \frac{d^2 Y^\alpha}{dy^2} + X^\alpha Y^\alpha \frac{d^2 Z^{\sigma\alpha}}{dz^2} \right) + \\ & + X^\alpha Y^\alpha U^\sigma(z) Z^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}^{\sigma\alpha} X^\alpha Y^\alpha Z^{\sigma\alpha}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Multiplico esta equação por $-\frac{2m^{*\alpha}}{\hbar^2 X^\alpha Y^\alpha Z^{\sigma\alpha}}$. Então,

$$\frac{1}{X^\alpha} \frac{d^2 X^\alpha}{dx^2} + \frac{1}{Y^\alpha} \frac{d^2 Y^\alpha}{dy^2} + \frac{1}{Z^{\sigma\alpha}} \left[\frac{d^2 Z^{\sigma\alpha}}{dz^2} - \frac{2m^{*\alpha}}{\hbar^2} U^\sigma(z) Z^{\sigma\alpha} \right] = -\frac{2m^{*\alpha}}{\hbar^2} \mathcal{E}^{\sigma\alpha}. \quad (\text{A.7})$$

O termo à direita do sinal de igual na equação (A.7) é constante. Além disto, os três termos somados à esquerda do sinal dependem, cada um, de apenas uma coordenada espacial. Portanto, cada um destes termos também é uma constante. Defino estas constantes da seguinte forma:

$$\frac{1}{X^\alpha} \frac{d^2 X^\alpha}{dx^2} = -(k_x^\alpha)^2 \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{1}{Y^\alpha} \frac{d^2 Y^\alpha}{dy^2} = -(k_y^\alpha)^2 \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{1}{Z^{\sigma\alpha}} \left[\frac{d^2 Z^{\sigma\alpha}}{dz^2} - \frac{2m^{*\alpha}}{\hbar^2} U^\sigma(z) Z^{\sigma\alpha} \right] = -(k_z^{\sigma\alpha})^2, \quad (\text{A.10})$$

para as quais

$$\mathcal{E}^{\sigma\alpha} = \frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha}} \left[(k_x^\alpha)^2 + (k_y^\alpha)^2 + (k_z^{\sigma\alpha})^2 \right]. \quad (\text{A.11})$$

Aqui, $k_z^{\sigma\alpha}$ é uma constante que coincide com $k_z^{\sigma\alpha}(z) \equiv \frac{p_z^{\sigma\alpha}(z)}{\hbar}$ apenas no emissor, no qual $U^\sigma(z) = 0$. A energia $\mathcal{E}^{\sigma\alpha}$ pode ser escrita como o somatório de três energias, da seguinte forma:

$$\mathcal{E}^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}_x^\alpha + \mathcal{E}_y^\alpha + \mathcal{E}_z^{\sigma\alpha} \quad (\text{A.12})$$

onde

$$\mathcal{E}_x^\alpha = \frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha}} (k_x^\alpha)^2 \quad (\text{A.13})$$

$$\mathcal{E}_y^\alpha = \frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha}} (k_y^\alpha)^2 \quad (\text{A.14})$$

$$\mathcal{E}_z^{\sigma\alpha} = \frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha}} (k_z^{\sigma\alpha})^2. \quad (\text{A.15})$$

Primeiro, resolverei as equação (A.8):

$$\frac{d^2 X^\alpha}{dx^2} + (k_x^\alpha)^2 X^\alpha = 0. \quad (\text{A.16})$$

Proponho uma solução do tipo

$$X^\alpha = A_x^\alpha e^{\xi x} \quad (\text{A.17})$$

assim, obtenho a equação característica

$$\xi^2 + (k_x^\alpha)^2 = 0 \quad (\text{A.18})$$

cuja solução é

$$\xi^\alpha = \pm i k_x^\alpha \quad (\text{A.19})$$

e, portanto,

$$X^\alpha = A_{x+}^\alpha e^{i k_x^\alpha x} + A_{x-}^\alpha e^{-i k_x^\alpha x}. \quad (\text{A.20})$$

Analogamente, a solução da equação (A.9) é

$$Y^\alpha = A_{y+}^\alpha e^{i k_y^\alpha y} + A_{y-}^\alpha e^{-i k_y^\alpha y}. \quad (\text{A.21})$$

Explorarei melhor a equação (A.10):

$$\frac{d^2 Z^{\sigma\alpha}(z)}{dz^2} + \left[(k_z^{\sigma\alpha})^2 - \frac{2m^{*\alpha}}{\hbar^2} U^\sigma(z) \right] Z^{\sigma\alpha} = 0. \quad (\text{A.22})$$

Como estou trabalhando com um sistema discretizado, posso escrever uma aproximação para a derivada discretizada através de diferenças finitas (o método de diferenças finitas, neste caso, equivale à aproximação “tight-binding”). Primeiramente, expandirei $Z^{\sigma\alpha}(z + \Delta z)$ em torno de z :

$$Z^{\sigma\alpha}(z + \Delta z) = Z^{\sigma\alpha}(z) + \Delta z \frac{dZ^{\sigma\alpha}(z)}{dz} + \dots \quad (\text{A.23})$$

Obtenho, então, a seguinte aproximação:

$$\frac{dZ^{\sigma\alpha}(z)}{dz} \approx \frac{Z^{\sigma\alpha}(z + \Delta z) - Z^{\sigma\alpha}(z)}{\Delta z}. \quad (\text{A.24})$$

Escrevo $Z^{\sigma\alpha}(z)$ como uma função discretizada

$$Z^{\sigma\alpha}(z_j) = \psi_j^{\sigma\alpha} \quad (\text{A.25})$$

sendo $z_j = ja$, $\Delta z_j = a$ e j um número inteiro. Deste forma, obtenho

$$\frac{dZ^{\sigma\alpha}(z_j)}{dz} = \frac{d\psi_j^{\sigma\alpha}}{dz} \approx \frac{\psi_{j+1}^{\sigma\alpha} - \psi_j^{\sigma\alpha}}{a}, \quad (\text{A.26})$$

$$\frac{d\psi_{j-1}^{\sigma\alpha}}{dz} \approx \frac{\psi_j^{\sigma\alpha} - \psi_{j-1}^{\sigma\alpha}}{a} \quad (\text{A.27})$$

e

$$\frac{d^2\psi_j^{\sigma\alpha}}{dz^2} = \frac{d}{dz} \left(\frac{d\psi_j^{\sigma\alpha}}{dz} \right) \approx \frac{\frac{d\psi_j^{\sigma\alpha}}{dz} - \frac{d\psi_{j-1}^{\sigma\alpha}}{dz}}{a} = \frac{\psi_{j+1}^{\sigma\alpha} - 2\psi_j^{\sigma\alpha} + \psi_{j-1}^{\sigma\alpha}}{a^2}. \quad (\text{A.28})$$

Portanto,

$$\frac{d^2 Z^{\sigma\alpha}(z_j)}{dz^2} \approx \frac{\psi_{j+1}^{\sigma\alpha} - 2\psi_j^{\sigma\alpha} + \psi_{j-1}^{\sigma\alpha}}{a^2}. \quad (\text{A.29})$$

Assim como a função de onda $Z^{\sigma\alpha}(z)$, a energia potencial $U^\sigma(z)$ é uma função discretizada em z :

$$U^{\sigma\alpha}(z_j) = U_j^\sigma. \quad (\text{A.30})$$

Então, a equação (A.22) fica da seguinte forma:

$$\frac{\psi_{j+1}^{\sigma\alpha} - 2\psi_j^{\sigma\alpha} + \psi_{j-1}^{\sigma\alpha}}{a^2} + \left[(k_z^{\sigma\alpha})^2 - \frac{2m^{*\alpha}}{\hbar^2} U_j^\sigma \right] \psi_j^{\sigma\alpha} = 0 \quad (\text{A.31})$$

ou

$$\psi_{j+1}^{\sigma\alpha} - 2\psi_j^{\sigma\alpha} + \psi_{j-1}^{\sigma\alpha} + \frac{2m^{*\alpha} a^2}{\hbar^2} \left[\frac{(k_z^{\sigma\alpha})^2 \hbar^2}{2m^{*\alpha}} - U_j^\sigma \right] \psi_j^{\sigma\alpha} = 0. \quad (\text{A.32})$$

Definindo

$$v^\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha} a^2}, \quad (\text{A.33})$$

obtenho

$$v^\alpha (\psi_{j+1}^{\sigma\alpha} - 2\psi_j^{\sigma\alpha} + \psi_{j-1}^{\sigma\alpha}) + (U_j^\sigma - \mathcal{E}_z^{\sigma\alpha}) \psi_j^{\sigma\alpha} = 0. \quad (\text{A.34})$$

Nos casos do emissor e do coletor nos quais $U_j^\sigma = U$ é constante, a equação (A.31) se torna:

$$\frac{\psi_{j+1}^\alpha - 2\psi_j^\alpha + \psi_{j-1}^\alpha}{a^2} + (k_z'^\alpha)^2 \psi_j^\alpha = 0 \quad (\text{A.35})$$

onde

$$(k_z'^\alpha)^2 = (k_z^\alpha)^2 - \frac{2m^{*\alpha} U}{\hbar^2}. \quad (\text{A.36})$$

Proponho a seguinte solução:

$$\psi_j^\alpha = A_{z_+}^\alpha e^{ik_z'^\alpha ja} + A_{z_-}^\alpha e^{-ik_z'^\alpha ja}. \quad (\text{A.37})$$

Ao substituir esta expressão, assim como $U_j^\sigma = U$ em (A.34) obtenho

$$\begin{aligned}
v^\alpha & \left[A_{z_+}^\alpha e^{ik'_z{}^\alpha(j+1)a} + A_{z_-}^\alpha e^{-ik'_z{}^\alpha(j+1)a} - 2 \left(A_{z_+}^\alpha e^{ik'_z{}^\alpha ja} + \right. \right. \\
& \left. \left. + A_{z_-}^\alpha e^{-ik'_z{}^\alpha ja} \right) + A_{z_+}^\alpha e^{ik'_z{}^\alpha(j-1)a} + A_{z_-}^\alpha e^{-ik'_z{}^\alpha(j-1)a} \right] + \\
& + (U - \mathcal{E}_z^\alpha) \left(A_{z_+}^\alpha e^{ik'_z{}^\alpha ja} + A_{z_-}^\alpha e^{-ik'_z{}^\alpha ja} \right) = 0
\end{aligned} \tag{A.38}$$

$$\begin{aligned}
& A_{z_+}^\alpha e^{ik'_z{}^\alpha ja} \left[v^\alpha \left(e^{ik'_z{}^\alpha a} - 2 + e^{-ik'_z{}^\alpha a} \right) + U - \mathcal{E}_z^\alpha \right] + \\
& + A_{z_-}^\alpha e^{-ik'_z{}^\alpha ja} \left[v^\alpha \left(e^{-ik'_z{}^\alpha a} - 2 + e^{ik'_z{}^\alpha a} \right) + U - \mathcal{E}_z^\alpha \right] = 0
\end{aligned} \tag{A.39}$$

$$\{v^\alpha [2 \cos(k'_z{}^\alpha a) - 2] + U - \mathcal{E}_z^\alpha\} \left\{ A_{z_+}^\alpha e^{ik'_z{}^\alpha ja} + A_{z_-}^\alpha e^{-ik'_z{}^\alpha ja} \right\} = 0. \tag{A.40}$$

Vemos que a expressão (A.37) proposta é solução se

$$\mathcal{E}_z^\alpha = 2v^\alpha [\cos(k'_z{}^\alpha a) - 1] + U. \tag{A.41}$$

No caso particular do coletor, $U = -eV$ e a equação (A.41) se torna

$$\mathcal{E}_z^\alpha = 2v^\alpha [\cos(k'_z{}^\alpha a) - 1] - eV. \tag{A.42}$$

Para o emissor, $U = 0$. Desta forma, tenho $k'_z{}^\alpha = k_z^\alpha$ e a equação (A.41) se torna

$$\mathcal{E}_z^\alpha = 2v^\alpha [\cos(k_z^\alpha a) - 1]. \tag{A.43}$$

Posso escrever a energia em função da frequência angular ω_z . Assim,

$$\mathcal{E}_z^\alpha(k_z^\alpha) = \hbar\omega_z^\alpha(k_z^\alpha). \tag{A.44}$$

Obtenho, então, as seguintes relações de dispersão:

$$\hbar\omega_z^\alpha(k'_z{}^\alpha) = 2v^\alpha [\cos(k'_z{}^\alpha a) - 1] - eV \tag{A.45}$$

e

$$\hbar\omega_z^\alpha(k_z^\alpha) = 2v^\alpha [\cos(k_z^\alpha a) - 1] \tag{A.46}$$

onde (A.45) é válida para o coletor e (A.46) é válida para o emissor.

Apêndice B

Normalização da função de onda

Nesta seção, determinarei $|A_i^{\sigma\alpha}|^2$ a partir da normalização da função de onda de um buraco. Portanto, imponho que cada componente da função de onda total esteja normalizada, de forma que esta também esteja. Restringir-me-ei à componente z , já que o termo $|A_i^{\sigma\alpha}|^2$ que aparece no final da última seção se refere à esta componente. Então, tenho que

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} |\psi_j^{\sigma\alpha}|^2 = 1. \quad (\text{B.1})$$

O somatório pode ser aproximado por uma integral através do método dos trapézios:

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} |\psi_j^{\sigma\alpha}|^2 = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi^{\sigma\alpha}(z)|^2 dz = 1. \quad (\text{B.2})$$

Primeiramente, divido o espaço z em três regiões: a região de espalhamento (S) (correspondente a figura 1.2) e as regiões do emissor (E) e do coletor (C). A região de espalhamento tem largura $d \approx 1000 \text{ \AA} = 1 \times 10^{-7} \text{ m}$ e o material tem largura $L_z \approx 1 \text{ cm} = 1 \times 10^{-2} \text{ m}$.

$$\frac{1}{a} \left[\int_{-\frac{L_z}{2}}^{-\frac{d}{2}} |\psi_E^{\sigma\alpha}(z)|^2 dz + \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} |\psi_S^{\sigma\alpha}(z)|^2 dz + \int_{\frac{d}{2}}^{\frac{L_z}{2}} |\psi_C^{\sigma\alpha}(z)|^2 dz \right] = 1. \quad (\text{B.3})$$

Em (E):

$$\psi^{\sigma\alpha}(z) = A_i^{\sigma\alpha} e^{ik_z^{\sigma\alpha} z} + A_r^{\sigma\alpha} e^{-ik_z^{\sigma\alpha} z} \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} |\psi^{\sigma\alpha}(z)|^2 &= \left(A_i^{\sigma\alpha*} e^{-ik_z^{\sigma\alpha} z} + A_r^{\sigma\alpha*} e^{ik_z^{\sigma\alpha} z} \right) \left(A_i^{\sigma\alpha} e^{ik_z^{\sigma\alpha} z} + A_r^{\sigma\alpha} e^{-ik_z^{\sigma\alpha} z} \right) \\ &= |A_i^{\sigma\alpha}|^2 + |A_r^{\sigma\alpha}|^2 + A_i^{\sigma\alpha*} A_r^{\sigma\alpha} e^{-2ik_z^{\sigma\alpha} z} + A_i^{\sigma\alpha} A_r^{\sigma\alpha*} e^{2ik_z^{\sigma\alpha} z} \\ &= |A_i^{\sigma\alpha}|^2 + |A_r^{\sigma\alpha}|^2 + 2\text{Re} \left(A_i^{\sigma\alpha*} A_r^{\sigma\alpha} e^{-2ik_z^{\sigma\alpha} z} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Antes de continuar, escrevo $A_i^{\sigma\alpha}$ e $A_r^{\sigma\alpha}$ da seguinte forma:

$$A_i^{\sigma\alpha} = |A_i^{\sigma\alpha}| e^{i\varphi_i} \quad (\text{B.6})$$

$$A_r^{\sigma\alpha} = |A_r^{\sigma\alpha}| e^{i\varphi_r} = \sqrt{R^{\sigma\alpha}} |A_i^{\sigma\alpha}| e^{i\varphi_r}. \quad (\text{B.7})$$

Volto á equação (B.5) e utilizando as equações (B.6) e (B.7) obtenho

$$|\psi^{\sigma\alpha}(z)|^2 = |A_i^{\sigma\alpha}|^2 + |A_r^{\sigma\alpha}|^2 + 2\text{Re} \left[|A_i^{\sigma\alpha}|^2 \sqrt{R^{\sigma\alpha}} e^{-i(2k_z^{\sigma\alpha} z + \varphi_i - \varphi_r)} \right] \quad (\text{B.8})$$

e definindo $\varphi = \varphi_i - \varphi_r$,

$$\begin{aligned} |\psi^{\sigma\alpha}(z)|^2 &= |A_i^{\sigma\alpha}|^2 + |A_r^{\sigma\alpha}|^2 + 2|A_i^{\sigma\alpha}|^2 \sqrt{R^{\sigma\alpha}} \cos(2k_z^{\sigma\alpha} z + \varphi) \\ &= |A_i^{\sigma\alpha}|^2 \left[1 + R^{\sigma\alpha} + 2\sqrt{R^{\sigma\alpha}} \cos(2k_z^{\sigma\alpha} z + \varphi) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Em (C), tenho apenas a onda transmitida:

$$\psi^{\sigma\alpha}(z) = A_T^{\sigma\alpha} e^{ik_z^{\sigma\alpha} z}, \quad (\text{B.10})$$

então,

$$|\psi^{\sigma\alpha}(z)|^2 = |A_T^{\sigma\alpha}|^2 = T^{\sigma\alpha} |A_i^{\sigma\alpha}|^2. \quad (\text{B.11})$$

Em (S), pelo fato de que $d \ll L_z$, a contribuição da região de espalhamento para (B.3) se faz desprezível em relação às contribuições do emissor e do coletor. Portanto, a equação (B.3) fica da seguinte forma:

$$\frac{1}{a} |A_i^{\sigma\alpha}|^2 \left\{ \int_{-\frac{L_z}{2}}^0 \left[1 + R^{\sigma\alpha} + 2\sqrt{R^{\sigma\alpha}} \cos(2k_z^{\sigma\alpha} z + \varphi) \right] dz + \int_0^{\frac{L_z}{2}} T^{\sigma\alpha} dz \right\} = 1. \quad (\text{B.12})$$

$R^{\sigma\alpha}$ e $T^{\sigma\alpha}$ não dependem de z . Reorganizando a equação, tenho

$$\frac{1}{a} |A_i^{\sigma\alpha}|^2 \left\{ 2\sqrt{R^{\sigma\alpha}} \int_{-\frac{L_z}{2}}^0 \cos(2k_z^{\sigma\alpha} z + \varphi) dz + (1 + R^{\sigma\alpha}) \int_{-\frac{L_z}{2}}^0 dz + T^{\sigma\alpha} \int_0^{\frac{L_z}{2}} dz \right\} = 1 \quad (\text{B.13})$$

e após resolver a segunda e terceira integrais obtenho

$$\frac{1}{a} |A_i^{\sigma\alpha}|^2 \left\{ 2\sqrt{R^{\sigma\alpha}} \int_{-\frac{L_z}{2}}^0 \cos(2k_z^{\sigma\alpha} z + \varphi) dz + (1 + R^{\sigma\alpha} + T^{\sigma\alpha}) \left(\frac{L_z}{2} \right) \right\} = 1. \quad (\text{B.14})$$

Resolverei agora a integral remanescente:

$$\begin{aligned}
\eta^{\sigma\alpha} &= 2\sqrt{R^{\sigma\alpha}} \int_{-\frac{L_z}{2}}^0 \cos(2k_z^{\sigma\alpha}z + \varphi) dz \\
&= \frac{\sqrt{R^{\sigma\alpha}}}{k_z^{\sigma\alpha}} \left[\text{sen}(2k_z^{\sigma\alpha}z + \varphi) \Big|_{-\frac{L_z}{2}}^0 \right] \\
&= \frac{\sqrt{R^{\sigma\alpha}}}{k_z^{\sigma\alpha}} [\text{sen}(\varphi) - \text{sen}(\varphi - k_z^{\sigma\alpha}L_z)].
\end{aligned} \tag{B.15}$$

Como,

$$-1 \leq \text{sen}(\varphi) \leq 1 \quad \text{e} \quad -1 \leq \text{sen}(\varphi - k_z^{\sigma\alpha}L_z) \leq 1 \tag{B.16}$$

segue que

$$-2 \leq \text{sen}(\varphi) - \text{sen}(\varphi - k_z^{\sigma\alpha}L_z) \leq 2. \tag{B.17}$$

Além disto,

$$0 \leq \sqrt{R^{\sigma\alpha}} \leq 1 \tag{B.18}$$

e, portanto,

$$|\eta^{\sigma\alpha}| \leq \frac{2}{|k_z^{\sigma\alpha}|}. \tag{B.19}$$

$k_z^{\sigma\alpha}$ pode ser obtido da equação (A.43):

$$\mathcal{E}_z^{\sigma\alpha} = 2v^\alpha [\cos(k_z^{\sigma\alpha}a) - 1].$$

Primeiro, suponho que $\mathcal{E}_z^{\sigma\alpha} \leq \mathcal{E}_F = 15 \text{ meV}$. Assim, $k_z^{\sigma\alpha}a \ll 1$ e, portanto, posso expandir o $\cos(k_z^{\sigma\alpha}a)$ em série e utilizar a seguinte aproximação:

$$\cos(k_z^{\sigma\alpha}a) \approx 1 - \frac{(k_z^{\sigma\alpha})^2 a^2}{2}, \tag{B.20}$$

de forma que,

$$\mathcal{E}_z^{\sigma\alpha} = -v^\alpha (k_z^{\sigma\alpha})^2 a^2 \tag{B.21}$$

$$k_z^{\sigma\alpha} = \pm \frac{1}{a} \sqrt{\frac{\mathcal{E}_z^{\sigma\alpha}}{-v^\alpha}} \tag{B.22}$$

onde $v^\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m^{*\alpha}a^2}$. Para HH, tenho $m^{*h} = 0,62m_e$; e para LH, tenho $m^{*l} = 0,087m_e$ [17]. Desta forma, obtenho $v^h = -769,29 \text{ meV}$ e $v^l = -5482,30 \text{ meV}$.

Se $\mathcal{E}_z^{\sigma\alpha} = \mathcal{E}_F$, tenho

$$k_z^{\sigma h} \approx \pm \frac{1}{7a} \quad , \quad k_z^{\sigma l} \approx \pm \frac{1}{19a} \quad (\text{B.23})$$

e, conseqüentemente,

$$|\eta^{\sigma h}| \approx 14a \quad , \quad |\eta^{\sigma l}| \approx 38a \quad (\text{B.24})$$

Lembro que $a = 2,828 \text{ \AA}$ e de (B.24) concluo que $|\eta^{\sigma\alpha}| \sim 10^2 \text{ \AA}$. Quando $V = 0 \text{ mV}$, obtenho $R^{\sigma\alpha} + T^{\sigma\alpha} = 1$; e quando $V \neq 0 \text{ mV}$, obtenho $R^{\sigma\alpha} + T^{\sigma\alpha} \approx 1$. Desta forma, $(1 + R^{\sigma\alpha} + T^{\sigma\alpha})\frac{L_z}{2} \approx L_z \approx 10^8 \text{ \AA}$ e concluo que $\eta^{\sigma\alpha}$ pode ser desprezado na equação (B.14).

Se $\mathcal{E}_z^{\sigma\alpha} \ll \mathcal{E}_F$, de forma que $\eta^{\sigma\alpha} \sim \frac{L_z}{2}$ tenho, de acordo com a equação (B.21),

$$\mathcal{E}_z^{\sigma\alpha} \sim -16 \frac{a^2 v^\alpha}{L_z^2} \sim 10^{-14} v^\alpha. \quad (\text{B.25})$$

Isto quer dizer que $\eta^{\sigma\alpha}$ tem valores da ordem de $\frac{L_z}{2}$ em uma faixa entre 0 e $10^{-14} v^\alpha$ da banda de energia mostrada na figura B.1. Portanto, $\eta^{\sigma\alpha}$ pode ser desprezada na equação (B.14) mesmo para valores muito pequenos de $k_z^{\sigma\alpha}$. Além disto, para $k_z^{\sigma\alpha}$ muito pequeno $T^{\sigma\alpha} \rightarrow 0$ e a contribuição das funções de onda com estes $k_z^{\sigma\alpha}$ é desprezível para o cálculo da corrente.

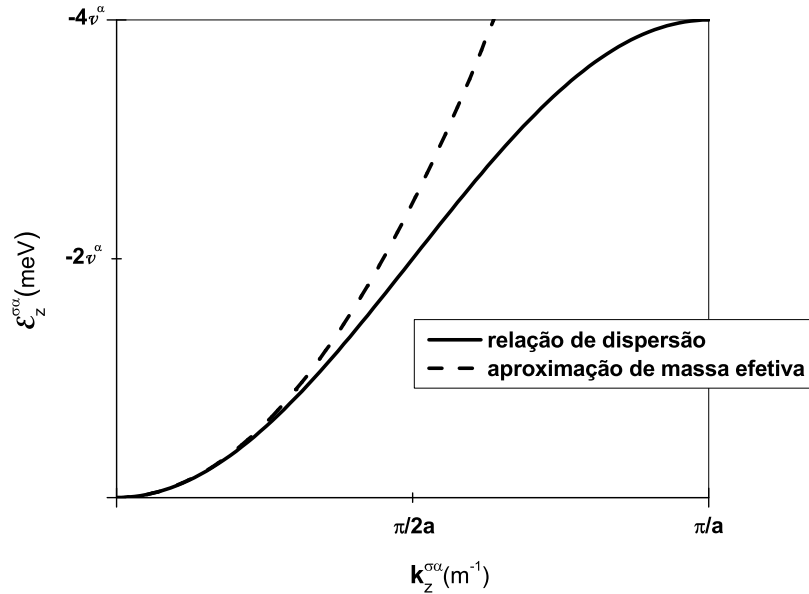


Figura B.1: Relação de dispersão no emissor.

Em resumo,

$$\frac{1}{a}|A_i^{\sigma\alpha}|^2 (1 + R^{\sigma\alpha} + T^{\sigma\alpha}) \frac{L_z}{2} = 1 \quad (\text{B.26})$$

e, finalmente, a expressão para $|A_i^{\sigma\alpha}|^2$ é

$$|A_i^{\sigma\alpha}|^2 = \frac{2a}{L_z (1 + R^{\sigma\alpha} + T^{\sigma\alpha})}. \quad (\text{B.27})$$

Bibliografia

- [1] H. Ohno, A. Sheen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto e Y. Iye, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 363 (1996).
- [2] H. Ohno, *Science* **281**, 951 (1998).
- [3] N. Akiba, F. Matsukura, Y. Ohno, A. Shen, K. Ohtani, T. Sakon, M. Motokawa e H. Ohno, *Physica B* **256-258**, 561 (1998).
- [4] P. Bruno e J. Wunderlich, *J. Appl. Phys.* **84**, 978 (1998).
- [5] T. Hayashi, M. Tanaka, K. Seto, T. Nishinaga, H. Shimada e K. Ando, *J. Appl. Phys.* **83**, 6551 (1998).
- [6] J. Szczytko, W. Mac, A. Twardowski, F. Matsukura, H. Ohno, *Phys. Rev. B* **59**, 12935 (1999).
- [7] Y. Ohno, D. K. Young, B. Bescoten, F. Matsukura, H. Ohno e D. D. Awschalom, *Nature* **402**, 790 (1999).
- [8] M. A. Boselli e I. C. da Cunha Lima, *J. Appl. Phys.* **87**, 6439 (2000).
- [9] S. Sapra, D. D. Sarma, S. Sanvito e N. A. Hill, *Nano Lett.* **2**, 605 (2002).
- [10] J. F. Gregg, I. Petej, E. Jouguelet e C. Dennis, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **35**, R121 (2002).
- [11] I. Žutić, J. Fabian e S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [12] S. Das Sarma, J. Fabian, X. Hu e I. Žutić, *Conference Digest*, 95, 58th Device Research Conference (2000).
- [13] S. Das Sarma, J. Fabian, X. Hu e I. Žutić, *Solid State Commun.* **119**, 207 (2001).
- [14] H. Ohno, N. Akiba, F. Matsukura, A. Shen, K. Ohtani e Y. Ohno, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 363 (1998).
- [15] I. Camps, S. S. Makler, H. M. Pastawski e L. E. F. Foa Torres, *Phys. Rev. B* **64**, 125311 (2001).

- [16] S. S. Makler, J. G. Zelkovic, M. A. Boselli e I. C. da Cunha Lima, *Physica B* **354**, 348 (2004).
- [17] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **58** (3), R1 (1985).
- [18] E. E. Mendez, W. I. Wang, B. Ricco e L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 415 (1985).
- [19] R. K. Hayden, D. K. Maude, L. Eaves, E. C. Valadares, M. Henini, F. W. Sheard, O. H. Hughes, J. C. Portal e L. Cury, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1749 (1991).
- [20] W. I. Wang e F. Stern, *J. Vac. Sci. Technol. B* **3**, 1280 (1985).
- [21] S. Massidda, B. I. Min e A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **35**, 9871 (1987).
- [22] R. Shioda, K. Ando, T. Hayashi, M. Tanaka, *Phys. Rev. B* **58**, 1100 (1998).
- [23] K. W. Edmonds, K. Y. Wang, R. P. Champion, A. C. Neumann, N. R. S. Farley, B. L. Gallagher e C. T. Foxon, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 4991 (2002).
- [24] A. M. Nazmul, S. Kobayashi, S. Sugahara e M. Tanaka, *Physica E* **21**, 937 (2004).
- [25] Y. Matsumoto, M. Murakami, T. Shono, T. Hasegawa, T. Fukumura, M. Kawasaki, P. Ahmet, T. Chikyow, S. Koshihara, and H. Koinuma, *Science* **291**, 854 (2001).
- [26] K. Ueda, H. Tabata e T. Kawai, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 988 (2001).
- [27] G. T. Thaler, M. E. Overberg, B. Gila, R. Frazier, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, J. S. Lee, S. Y. Lee, Y. D. Park, Z. G. Khim, J. Kim e F. Ren, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 3964 (2002).
- [28] H. Ohno, *J. Vac. Sci. Technol. B* **18**, 2039 (2000).
- [29] T. Dietl, H. Ohno e F. Matsukura, *Phys. Rev. B* **63**, 195205 (2001).
- [30] F. Matsukura, H. Ohno, A. Shen e Y. Sugawara, *Phys. Rev. B* **57**, R2037 (1997).
- [31] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert e D. Ferrand, *Science* **287**, 1019 (2000).
- [32] Antônio J. R. da Silva, A. Fazzio, Raimundo R. dos Santos e Luiz E. Oliveira, *Phys. Rev. B* **74**, 125208 (2005).
- [33] A. Ghazali, I. C. da Cunha Lima e M. A. Boselli, *Phys. Rev. B* **63**, 153305 (2001).
- [34] S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, I. C. da Cunha Lima, G. M. Sipahi, M. A. Boselli, *Phys. Rev. B* **70**, 165308 (2004).
- [35] L. L. Chang, L. Esaki e R. Tsu, *Appl. Phys. Lett.* **24**, 593 (1974).
- [36] C. W. J. Beenakker e H. van Houten, *Solid State Phys.* **44**, 1 (1991).

- [37] R. Landauer, IBM J. Res. Develop. **1**, 223 (1957).
- [38] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).
- [39] G. M. Sipahi, S. C. P. Rodrigues, L. M. R. Scolfaro, I. C. da Cunha Lima, Appl. Phys. Lett. **85**, 6209 (2004).
- [40] S. S. Makler, M. A. Boselli, J. Weberszpil, X. F. Wang e I. C. da Cunha Lima, Physica B **320**, 396 (2002).