

1

Introdução

O grande avanço tecnológico ocorrido nas últimas décadas deve-se principalmente aos estudos de semicondutores. Computadores que na década de 60 ocupavam espaços enormes com custos astronômicos, não tinham, nem de longe, a mesma eficiência que pequenos computadores portáteis dos dias de hoje. Em busca de maior eficiência, menor preço e de tamanhos cada vez mais reduzidos, surgiram os circuitos integrados na década de 60, e se iniciou uma pesquisa muito grande em transistores. Veio a década de 70, e foi possível o crescimento de filmes finos com espessuras nanométricas, graças ao que é chamado no meio científico de **MBE** (“Molecular Beam Epitaxy”, Epitaxia de Feixe Molecular), capaz de depositar finas camadas semicondutoras de diferentes materiais uma sobre a outra, formando verdadeiros sanduíches cristalinos. Toda essa miniaturização fez da mecânica quântica peça fundamental na evolução tecnológica. Na década de 80, essas técnicas foram aplicadas a semicondutores do grupo III-V¹, por exemplo GaAs e suas ligas como GaAlAs e InGaAs, e criada a possibilidade de dopagem modulada^{2,3}. Devido ao forte confinamento, os elétrons nesses dispositivos passam a ter características quânticas, mostrando espectros de energia discretos, e a possibilidade de um comportamento dinâmico de dimensionalidade reduzida⁴. O interesse particular nesses materiais formados por compostos do grupo III-V pode ser resumido ao fato de que compostos com diferenças significativas no “gap” de energia (intervalo proibido de energia entre o topo da banda de valência e fundo da banda de condução) possuem parâmetros de rede muito similares. Este último fato é determinante na produção de interfaces bem definidas entre os filmes. Além disso, esses materiais apresentam uma drástica redução nas respectivas massas efetivas dos elétrons de condução⁵, facilitando a observação de fenômenos associados à presença de campo magnético externo.

A associação de técnicas de crescimento de camadas semicondutoras com técnicas de nanolitografia na elaboração de máscaras e contatos tornou possível uma redução ainda maior na dimensionalidade, levando a sistemas uni- e zero-dimensionais. Quando as reduções nas dimensões desses sistemas ultrapassam escalas características, nota-se uma brusca transformação de suas propriedades no tocante à condução elétrica, apresentando

fenômenos como interferências, não visíveis no transporte clássico. Este é o campo de estudos da Física de Sistemas Mesoscópicos^{6–8}. As escalas características, do ponto de vista do transporte, são aquelas que determinam o transporte ôhmico ou quântico: (i) λ , o comprimento de onda de de Broglie, que é relacionado à energia cinética dos elétrons no nível de Fermi; (ii) l_e , o livre caminho médio para espalhamento elástico, que é a distância que o elétron percorre até a perda da memória do seu momento inicial; (iii) l_i , o comprimento de coerência, associado aos choques inelásticos, que é a distância que o elétron percorre até a perda da memória de sua fase inicial. Estas escalas características devem ser comparadas com o comprimento da amostra, L . Quando este comprimento for da ordem, ou menor que o comprimento de onda de de Broglie, o transporte será quântico, mas se este comprimento for maior que λ , o transporte será ôhmico.

Recentemente um novo campo na área tecnológica tem causado muito interesse entre os pesquisadores, a Spintrônica⁹. Além de ter o controle da carga, tornou-se possível o controle da polarização desta, ou seja, do spin das partículas portadoras de carga. Algumas vantagens devem ser apontadas. Primeiramente, o tempo de coerência de spin, em geral, é maior que o de relaxação do momento. O aprimoramento desta tecnologia aponta para a possibilidade da existência de um computador quântico onde, ao invés de trabalhar com a linguagem binária usual dos dias de hoje, composta apenas por 0 e 1, usará uma combinação de estados exatamente como estamos acostumados a lidar na mecânica quântica. É esperado que equipamentos eletrônicos sensíveis ao spin abram uma nova perspectiva em tecnologias de semicondutores. Portanto, a possibilidade de injetar e controlar spin eletrônico em semicondutores é de grande interesse para a comunidade científica e tem sido tema de diversos trabalhos.

A motivação desta tese foi estudar o controle de polarização de corrente em um dispositivo composto por um ponto quântico ligado a dois contatos, de maneira a ter um perfeito filtro de spin com um sistema composto de um ponto quântico ligado a dois reservatórios. Estaremos trabalhando no regime balístico onde, em relação às escalas já mencionadas, teremos o livre caminho médio inelástico, l_i , maior que o comprimento da amostra, L ^{10,11}. Para ser possível tal modulação no tocante à polarização, usamos alguns agentes externos, como campo magnético e campo elétrico, e levamos em consideração a interação spin-órbita. No decorrer deste estudo, foi possível comprovar alguns fenômenos físicos de grande interesse na área de semicondutores. Citamos como exemplo o bloqueio coulombiano e o efeito Rashba¹². Num primeiro momento, tratamos o problema no equilíbrio, com a variação do potencial de porta controlando o nível de energia dos

estados localizados no ponto quântico. Em seguida, usamos o formalismo de Keldysh¹³⁻¹⁷ para o estudo do sistema longe do equilíbrio com a aplicação de um campo elétrico finito. Por último, analisamos a evolução temporal de uma carga que percorre o sistema, e conseguimos resultados interessantes para o processo de leitura de spins em pontos quânticos, sugerindo um bom mecanismo de “efeito memória”.

O tema de modulação de spin tem sido tratado com frequência na literatura recente. Assim, citaremos alguns autores que têm contribuído com seus estudos para o desenvolvimento deste tema. Francisco Mireles e George Kirczenow¹⁸ fizeram cálculos das propriedades de transporte de spin em sistemas compostos por fios quase unidimensionais na presença de interação spin-órbita, onde foi encontrada uma boa modulação para o spin do elétron em um dispositivo composto de um material ferromagnético e semicondutores. R. M. Potok¹⁹ apresentou medidas de transição de spins entre os estados localizados de um ponto quântico de GaAs no regime de bloqueamento coulombiano, onde é feita uma comparação entre transporte no estado fundamental e em estados excitados com amostras submetidas a um campo magnético externo, determinando valores extremamente precisos da energia necessária para acrescentar ou retirar elétrons de um ponto quântico já carregado, assim como medidas precisas do fator de Landé. Yu Zhu e Tsung-han Lin²⁰, propuseram um mecanismo para escrever spin em um ponto quântico usando dispositivos compostos de ferromagnético/ponto quântico/supercondutor. Aplicando um campo elétrico externo em suas amostras, foi possível escrever determinado spin no ponto quântico. Esta escrita é feita valendo-se da propriedade de materiais ferromagnéticos terem naturalmente uma polarização pré-determinada, e ao mesmo tempo um supercondutor poder conter apenas pares de Cooper formados por elétrons de spins opostos. Por último, é importante citar o trabalho de Mandar M. Deshmukh e D. C. Ralph²¹ onde é estudado o tunelamento em um ponto quântico de alumínio entre dois materiais ferromagnéticos, que também é usado como filtro de spin. É mostrado como níveis de energia desdobrados pelo efeito Zeeman podem ser usados para a obtenção de medidas de polarização em tunelamentos. Além disso, é proposto que diferenças entre as funções de onda com spin para cima e para baixo nas interfaces magnéticas podem resultar em uma redistribuição de carga como função do campo magnético. Uma relação mais detalhada de trabalhos correlacionados será citada no decorrer desta tese.

Neste trabalho, na parte referente ao sistema em equilíbrio, conseguimos, além de selecionar o spin eletrônico no ponto quântico com o efeito Zeeman, mostrar de

maneira bem clara o bloqueio coulombiano causado por uma carga já existente no ponto quântico. Foi possível, também, selecionar de maneira precisa a corrente de spin tunelada. Na parte onde o campo elétrico é aplicado, tendo como consequência a retirada de equilíbrio do sistema, também houve um controle na corrente, e nossos resultados se mostraram extremamente satisfatórios. No estudo da evolução temporal da função de onda, conseguimos, com o uso de nosso modelo, um perfeito sistema de leitura de spins em pontos quânticos.

Esta tese está dividida da maneira seguinte. No que segue desta Introdução apresentaremos um resumo sobre ponto quântico, tunelamento ressonante e efeito Rashba. No Capítulo II o modelo teórico tratado é apresentado, mostrando o hamiltoniano utilizado, e fazendo uma breve revisão das funções de Green e do método de Keldysh para o cálculo da corrente. No Capítulo III são discutidos os resultados da corrente e carga no ponto quântico no equilíbrio, isto é, a campo elétrico infinitesimal e também o caso longe do equilíbrio. No Capítulo IV são apresentados os resultados de fenômenos dinâmicos, isto é, a evolução temporal da carga representada pelo pacote de onda no sistema tratado.

1.1 Ponto Quântico (PQ)

Um ponto quântico (PQ), é um sistema no qual o confinamento do gás de elétrons existe em todas as três direções espaciais, resultando em um espectro discreto de energia. Isso justifica o fato de muitas vezes serem chamados de átomos artificiais. Mas, diferentemente do átomo, além da ausência no núcleo, o número de elétrons em um PQ pode ser controlado através da aplicação de um potencial externo. Primeiramente uma estrutura é crescida, sendo a parte ativa, aquela representada pela formação de um gás de elétrons quase bidimensional, composta de três camadas semicondutoras, por exemplo, GaAlAs/GaAs/GaAlAs, no qual o material do meio (GaAs) apresenta o mínimo da banda de condução abaixo dos materiais vizinhos. Um gás de elétrons é gerado nesta região do meio através de dopagem remota² com impurezas rasas doadoras (para o caso de uma dopagem tipo n). Posteriormente, por técnicas litográficas, contatos metálicos (em geral ouro) são depositados e formam uma máscara desenhada de acordo com o confinamento desejado, como mostrado na fig. (1.1). Este confinamento é obtido pela aplicação de um potencial chamado potencial de porta. Através da variação deste potencial de porta é possível moldar o formato do gás inicialmente bidimensional ou, analisando de uma outra maneira, elevar e abaixar os níveis de energia dos estados localizados do ponto quântico,

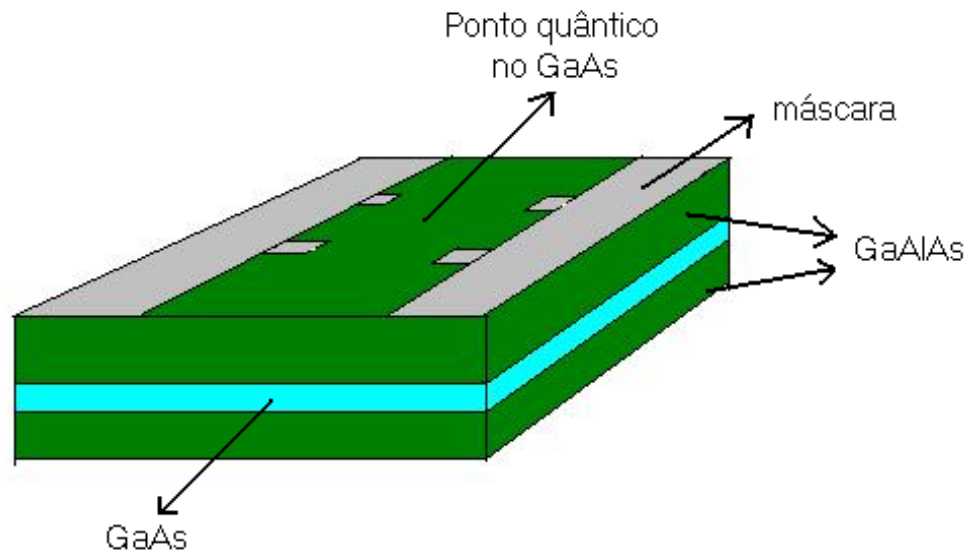


Figura 1.1: Representação de uma heteroestrutura semicondutora formando um ponto quântico.

controlando, assim, o nível de Fermi e o número de elétrons.

Pontos quânticos suficientemente pequenos podem ser produzidos de modo que apenas a introdução de um elétron é capaz de mudar as propriedades de transporte dramaticamente, devido à energia associada a este elétron extra. Um dos efeitos mais importantes é o bloqueio coulombiano²², onde oscilações de condutância são observadas com a adição ou a subtração de um elétron do PQ.

Diferentemente de um átomo real, o PQ pode ser isolado experimentalmente e suas propriedades de transporte podem ser estudadas. Graças à quantização de cargas existe uma determinada energia que um elétron necessita para atravessar um PQ já carregado. Esta energia é da mesma ordem de grandeza da repulsão coulombiana entre dois elétrons dentro do PQ. A quantização de cargas e de energias tem um papel importante nas propriedades de transporte do sistema. A condutância exhibe oscilações em função do potencial externo aplicado que podem ser explicadas em termos de um mecanismo de transporte governado pelo tunelamento de um elétron, e pelo efeito de bloqueio coulombiano para a interação elétron-elétron (e-e) dentro do PQ²³.

1.2 Tunelamento Ressonante

De uma maneira geral, tunelamento é um fenômeno quântico que reflete a possibilidade de uma partícula atravessar uma região proibida classicamente, como uma barreira de potencial. Quando estados de ressonância são atingidos, existe uma grande probabilidade da partícula tunelar através da barreira.

Neste momento, torna-se necessário um comentário sobre as dimensões em que este confinamento pode ser feito. No caso do confinamento ser em apenas uma dimensão, teremos elétrons livres nas outras duas dimensões. Na direção onde há confinamento (dupla barreira), o sistema terá estados localizados com contribuições discretas às energias. No caso do confinamento ser em duas dimensões, os elétrons serão ditos livres em apenas uma direção tendo seu movimento confinado nas outras duas direções e conseqüentemente contribuições discretas à energia nestas direções (fio quântico). Ainda existe o terceiro caso, que ao longo desta tese será estudado em profundidade, quando o elétron têm seu movimento confinado nas três direções, tornando os níveis de energia discretizados em todas as três direções (ponto quântico).

Tunelamento ressonante surge devido à quantização em estruturas confinadas. Não é possível observar tunelamento ressonante se a largura entre as barreiras for grande o suficiente para tornar a distância entre os níveis de energia muito próximos, comparados com $k_B T$, onde k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura.

A dependência da corrente com a voltagem ($I - V$) em uma dupla barreira pode ser facilmente compreendida se sabemos que a região entre as duas barreiras pode ser vista como uma “caixa quântica”, que confina elétrons. Através da mecânica quântica elementar, já é de nosso conhecimento que elétrons confinados em uma dupla barreira possuem níveis de energia discretizados (na verdade, picos ressonantes estreitos), cujo espaçamento aumenta à medida que a distância entre as barreiras fica menor. A condutância apresentará um pico quando o nível de Fermi do reservatório de elétrons coincidir com as auto energias dos estados confinados na “caixa quântica”. Nos dias de hoje é possível produzir, usando hetero-estruturas semicondutoras, amostras com dupla barreira tão pequenas ao ponto de haver apenas um nível de energia confinado (E_r).

A fig. (1.2) representa um esquema simplificado do diagrama de bandas. Este esquema será adotado como modelo de nosso sistema, que consiste em um emissor localizado no lado esquerdo (com energia de Fermi μ_1) e um coletor no lado direito (com energia de Fermi μ_2) com um poço quântico no centro, cujo estado localizado é (E_r). Esta estrutura age como um filtro, que permite apenas a transmissão de elétrons com

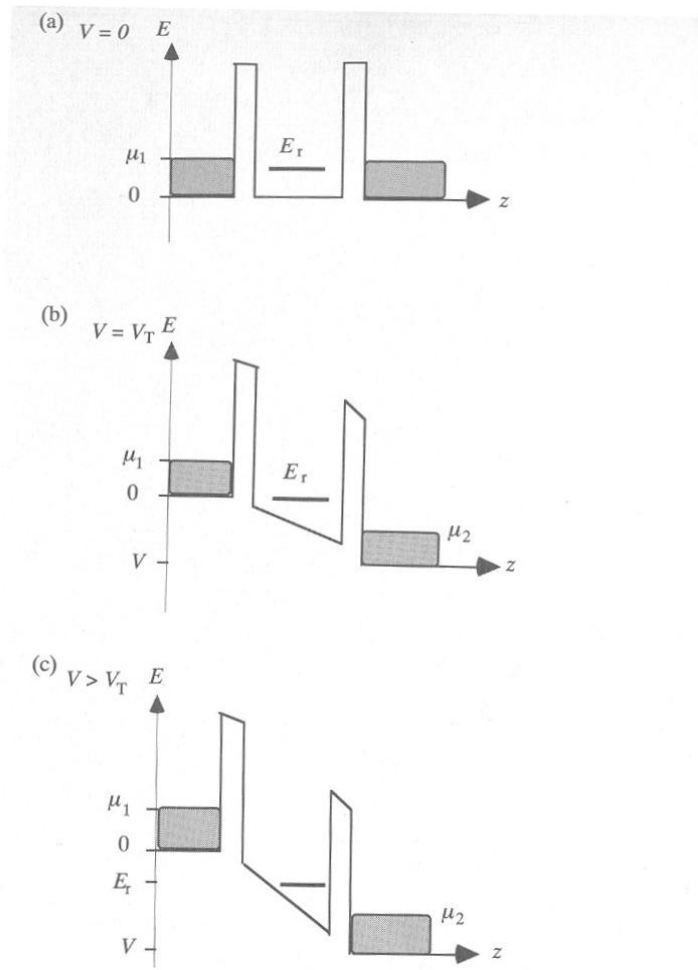


Figura 1.2: Diagrama de níveis de uma dupla barreira submetida a um campo elétrico.

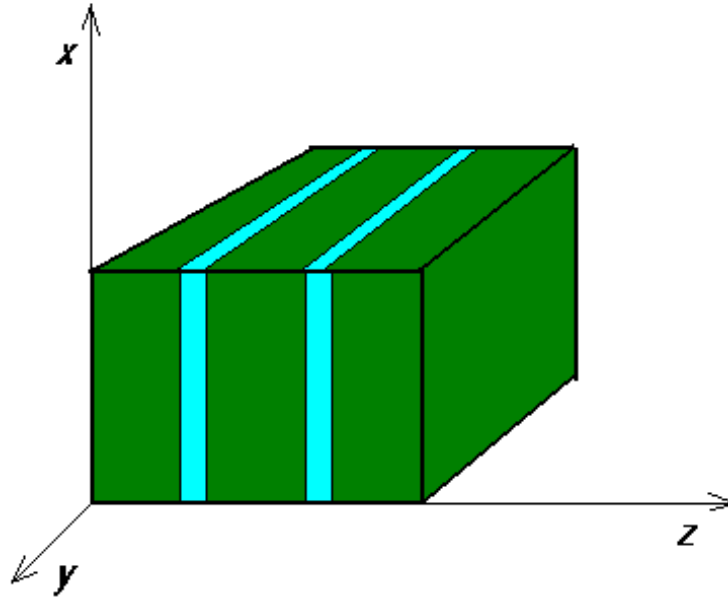


Figura 1.3: Heteroestrutura semicondutora de dupla barreira. A figura mostra duas camadas representando barreiras (de cor mais clara) e uma camada entre elas onde se situa o poço quântico.

energia única (E_r). Quando um estado ligado (pico estreito) está na região delimitada pelas energias de Fermi das duas regiões, o sistema está em ressonância (a). Um potencial externo abaixa a energia de ressonância em relação à energia dos elétrons incidentes do emissor (b). Quando o potencial excede a voltagem V_T , a energia de ressonância fica abaixo da banda de condução do emissor, e ocorre uma queda abrupta na corrente (c).

O movimento perpendicular ao eixo de crescimento, supondo que a interface é perfeita, é expresso por uma onda plana que durante o processo de tunelamento tem o momento conservado $\vec{k}_\perp = (k_x, k_y)$. Logo, podemos separar a energia total dos elétrons em duas partes distintas, uma na direção paralela ao eixo de crescimento das barreiras (direção z) e outra paralela a região de crescimento (x e y). Desta forma a energia total é determinada por:

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_z + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) \quad (1.1)$$

A energia e o momento na direção perpendicular à direção de crescimento das barreiras durante o processo de tunelamento devem ser conservadas. Conseqüentemente, o

tunelamento ocorre quando estados com energia por baixo do nível de Fermi do emissor possuem a mesma relação de dispersão $\varepsilon(k)$ de partícula livre na região emissora e no poço. Quando o potencial externo empurra o estado ligado por baixo da base da banda de condução, a condição do k_{\perp} não pode ser mais satisfeita e ocorre uma queda abrupta na corrente. Se tivermos o caso de mais de um estado ligado no poço e continuarmos aumentando este potencial, ocorrerá um novo aumento na corrente devido a este novo estado ligado no poço quântico. Chamamos esta região de queda abrupta na corrente de “região de condutividade diferencial negativa”.

O tunelamento através de um PQ se passa de modo análogo ao descrito acima, com a dimensionalidade do problema reduzida, visto que em um ponto quântico os elétrons estão confinados nas três direções espaciais fazendo com que suas energias sejam quantizadas em todas estas direções.

No decorrer desta tese adotaremos a base de ligações fortes para representar o hamiltoniano que descreve o sistema e com ele estudar o tunelamento ressonante. As diferentes regiões que compõem este sistema são caracterizadas por elementos de matriz diagonal e não diagonal que dependem da localidade. Um cálculo detalhado da corrente pode ser visto no Capítulo II.

1.3 Interação spin-órbita e efeito Rashba

Relaxação de spin se refere a processos que levam para o equilíbrio uma população de spin inicialmente desequilibrada. A presença de vários tipos de interação causa uma queda exponencial em direção a zero da parte da magnetização longe do equilíbrio. A interação spin-órbita é o principal dentre esses processos. Ele é um efeito relativístico que ocorre quando uma partícula quântica com spin diferente de zero se move em uma região onde o campo elétrico é não nulo.

Quando um elétron está se movendo com velocidades relativísticas em um meio com campo elétrico estacionário, no referencial do elétron o campo elétrico original se transforma em um campo que possui uma componente magnética, onde sua intensidade é dada pela seguinte transformação de Lorentz²⁴:

$$\mathbf{B}_{ef}(x) = (\mathbf{v} \times \mathbf{E}(x))/c^2$$

A presença do campo magnético efetivo que o elétron sente no seu referencial

afeta tanto a dinâmica de spin quanto a energia total do elétron. Essa interação é chamada de interação spin-órbita. Deve-se lembrar que a única interação possível para o grau de liberdade do spin é o campo magnético, que por sua vez pode ser de uma fonte externa ou de um campo efetivo gerado pela interação spin-órbita. O campo elétrico estacionário que causa a interação spin-órbita pode ter diversas origens como, por exemplo, um campo externo aplicado, o campo elétrico de núcleos atômicos, ou campos relacionados a estruturas de bandas de sólidos. Três mecanismos principais de relaxação de spin são considerados relevantes para elétrons de condução em metais e semicondutores: Elliot-Yafet²⁵, D'yakonov Perel²⁶, e Bir-Aronov-Pikus²⁷. No caso da interação spin-órbita causado por um campo elétrico externo, o mecanismo mais importante é o efeito Rashba^{12,28}. Ele é descrito, para um gás de elétrons num plano xy sob ação de um campo elétrico na direção z pelo seguinte termo no hamiltoniano,

$$H_{so} = \frac{\alpha}{\hbar} \left(\vec{\sigma} \times \vec{p} \right) \cdot \vec{\nu}, \quad (1.2)$$

onde o parâmetro de Rashba (α) incorpora a informação da intensidade do campo, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de spin de Pauli, \vec{p} é o operador momento, e $\vec{\nu}$ é o versor na direção do campo elétrico. Este é um efeito importante em sistemas de baixa dimensionalidade quando um campo elétrico é aplicado numa direção perpendicular àquela em que os elétrons se movem. Como será mostrado no capítulo seguinte (eq. 2.18), levando-se em consideração o termo de Rashba, a relação de dispersão de um gás de elétrons unidimensional é:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \pm \alpha k \quad (1.3)$$

que representa duas parábolas deslocadas. A implicação dessa relação é que existem duas partículas distintas com mesma energia para um determinado k .