

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

FILIPE SAMMARCO

Magnetocondutância de fios quânticos
interagentes

São Carlos

2009

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

FILIPE SAMMARCO

Magnetocondutância de fios quânticos
interagentes

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Básica.

Orientador: Prof. Dr. José Carlos Egues.

São Carlos

2009

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação IFSC/USP

Sammarco, Filipe.

Magnetocondutância de fios quânticos interagentes / Filipe Sammarco; orientador José Carlos Egues de Menezes.-- São Carlos, 2009.

107 p.

Dissertação (Mestrado em Ciência - Área de concentração: Física Básica) – Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo.

1. Spintrônica. 2. Anomalia/ análogos 0.7. 3. Fios quânticos interagentes. 4. Formalismo de Landauer-Büttiker. 5. Teoria do funcional da densidade. I. Título.

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho aos meus pais, Carmem e Celso, e ao meu irmão André.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a meus pais por estarem sempre presentes e me apoiando neste longo tempo de mestrado. Ao meu pai pelo esforço e preocupação em não deixar faltar nada essencial em minha vida. À minha mãe pelo apoio psicológico em horas difíceis.

Ao meu irmão pelo companheirismo e pelas estadias e noites em bares na cidade de Ribeirão Preto.

Aos meus amigos Vinícius e Ricardo pelos conselhos e pelo tempo de convivência harmônica debaixo do mesmo teto. Invejo o Vinícius pela sua inteligência e o Ricardo pela dedicação.

Aos meus amigos de curso Marco (Marcão), Bruno (Magda), Rafael (Kazão), Jader (Roninho) e Felipe (Lorenzen). Ao Lorenzen pelas longas partidas de Tênis nos clubes de São Carlos e pelas noites sempre acompanhadas por boas cervejas (quando abirmos um bar você será o mestre cervejeiro). Ao Roninho por ser meu amigo depois de conhecer minha prima, e mostrar que físico também pode fazer academia (quando abirmos um bar você será o segurança). Ao Kazão por sempre estar disposto à uma parada gastronômica, nem que isto leve uma hora de estrada para comer coxinhas douradas de Bueno de Andrada (quando abirmos um bar você será o chefe de cozinha). Ao Marcão por mostrar que uma camiseta da USP pode durar mais que cinco anos, pelas músicas e vídeos descobertos no site www.youtube.com e pelas festas sempre acompanhadas por boas músicas (quando abirmos um bar você contratará as bandas de rock). Ao Magda pelas noites no pub entre amores mal resolvidos (quando abirmos um bar você e eu seremos os administradores por que não sabemos fazer nada).

Ao meu amigo Gabriel (Brad) pelos almoços discutindo o que faremos no futuro e por sempre estar disposto a viajar para qualquer lugar.

À secretária do grupo Cris pelo sorriso sempre disposto a ajudar e resolver os problemas que nós estudantes nem sonhamos em como resolver.

Ao orientador J. C. Egues por me ensinar que uma pergunta simples pode gerar uma discussão de quatro horas sobre física, pelo profissionalismo e pelos momentos de descontração com professores e alunos nos bares de São Carlos.

Aos membros do grupo Marco, Gerson, Poliana, Felipe, Thiago e professor Esmerindo

pelas longas reuniões de grupo e pelas dúvidas resolvidas. Em especial ao Gerson que foi meu co-orientador informal durante estes anos de mestrado.

Aos funcionários do IFSC pela eficiência e preocupação em resolver os problemas burocráticos.

[É] mais freqüente que a confiança seja gerada pela ignorância do que pelo conhecimento: são os que conhecem pouco, e não os que conhecem muito, os que afirmam tão positivamente que este ou aquele problema nunca será solucionado pela ciência.

Charles Darwin, introdução, *The descent of man* (1871)

RESUMO

SAMMARCO, F. **Magnetocondutância de fios quânticos interagentes**. 2009. 93 p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

A condutância de fios quânticos definidos em uma geometria de “split gate” varia em platôs quantizados de $2e^2/h$ em relação à ocupação dos seus modos transversais [van Wees *et al.* Phys. Rev. Lett. **60**, 848 (1988) & Wharam *et al.* J. Phys. C: solid state phys. **21**, L209 (1988)]. Em gráficos da condutância esta ocupação é dada pelo potencial aplicado aos eletrodos que formam o fio. Em 1996 observou-se experimentalmente nestes gráficos [Thomas *et al.* Phys. Rev. Lett. **77**, 135 (1996)] que quando apenas um modo transversal é ocupado a condutância exibe um platô anômalo adicional em $0.7 \times 2e^2/h$. Desde então, a origem desta anomalia 0.7 é associada a fenômenos dependentes de spin, porém sua descrição teórica permanece como importante objeto de pesquisa. Recentemente, observou-se que na presença de altos campos magnéticos, cruzamentos de modos transversais de spins opostos também geram estruturas anômalas no gráfico da condutância [Graham *et al.* Phys. Rev. Lett. **91**, 136404 (2003)]. Os análogos 0.7, assim chamados devido à semelhança com a anomalia 0.7, são usualmente relacionados ou como “anti-crossings” ou como transições de fase magnética. Motivado pela concordância quantitativa com experimentos de um trabalho anterior em magnetotransporte em 2DEGs e transições de fase de ferromagnetismo de efeito Hall quântico via teoria do funcional da densidade dependente de spin (SDFT) [Freire e Egues, Phys. Rev. Lett. **99**, 026801 (2007) & Ferreira *et al.* Phys. Stat. Sol. (c) **3**, 4364 (2006)], propomos aqui um modelo similar para estudar a magnetocondutância de fios quânticos. Utilizamos (i) a SDFT resolvendo as equações de Kohn-Sham autoconsistentemente dentro da aproximação de densidade local de spin para obter a estrutura eletrônica do fio quântico e (ii) o formalismo de Landauer-Büttiker para calcular a condutância do fio no regime de resposta linear. Em nosso modelo, a anomalia e os análogos 0.7 aparecem devido a transições ferromagnéticas que rearranjam de forma abrupta os modos transversais do fio quântico próximos ao nível de Fermi. Nossos resultados teóricos apresentam boa concordância com os dados de Graham *et al.*

Palavras-chave: Spintrônica. Anomalia/análogos 0.7. Fios quânticos interagentes. Formalismo de Landauer-Büttiker. Teoria do funcional da densidade.

ABSTRACT

SAMMARCO, F. **Magnetoconductance of interacting quantum wires**. 2009. 93 p. Thesis (Master's degree) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

At low temperatures the conductance of a quantum wires exhibits plateaus at integer multiples of $2e^2/h$ due to the quantization of the transverse modes [van Wees *et al.* Phys. Rev. Lett. **60**, 848 (1988) & Wharam *et al.* J. Phys. C: solid state phys. **21**, L209 (1988)]. This conductance behavior is understood within an independent particles model. In 1996 Thomas *et al.* [Phys. Rev. Lett. **77**, 135 (1996)] showed experimentally that when only one transverse mode is occupied, the conductance displays an additional plateau at $0.7 \times 2e^2/h$ the so-called 0.7 anomaly. Further experiments have shown that in the presence of high in-plane magnetic fields, similar structures also appear in the conductance near the crossings of spin-split transverse modes [Graham *et al.* Phys. Rev. Lett. **91**, 136404 (2003)]. These so-called 0.7 analogs, due to their similarity to the 0.7 anomaly, are usually related to either anti-crossings or magnetic phase transitions. Motivated by the quantitative agreement with experiments of a previous theoretical work on magnetotransport in 2DEGs and quantum Hall ferromagnetic phase transitions via the Spin Density Functional Theory (SDFT) [Freire and Egues, Phys. Rev. Lett. **99**, 026801 (2007) & Ferreira *et al.* Phys. Stat. Sol. (c) **3**, 4364 (2006)], here we propose a similar model to investigate the magnetoconductance of interacting quantum wires. We use (i) the SDFT via the Kohn-Sham self-consistent scheme within the local spin density approximation to obtain the quantum wire electronic structure and (ii) the Landauer-Büttiker formalism to calculate the conductance of a quantum wire in the linear response regime. Our results show good agreement with the data of Graham *et al.*

Keywords: Spintronics. 0.7 anomaly/analog. Interacting quantum wires. Landauer-Büttiker formalism. Spin-density functional theory.

Lista de Figuras

- Figura 1.1 - Heteroestrutura semicondutora de GaAs/Al_xGa_{1-x}As. A diferença de energia entre a banda de valência e a banda de condução da liga binária GaAs é menor que a da liga ternária AlGaAs. Desta forma, forma-se um poço quântico nas interfaces destas camadas. Os níveis discretos do poço quântico são preenchidos pelos elétrons fornecidos pelas camadas de doadores. 28
- Figura 1.2 - Figura esquemática da geometria de *split gate*. A heteroestrutura semicondutora forma o gás de elétrons bidimensional na interface GaAs/AlGaAs. Aplicando uma voltagem negativa V_g nos gates localizados na superfície da heteroestrutura confinamos os elétrons que estão abaixo deles e assim formamos o quantum wire. 29
- Figura 1.3 - Figura esquemática do potencial gerado pelo *split gate* no plano do 2DEG. Quando aumentamos negativamente a tensão aplicada nos eletrodos do *split gate* aumentamos o confinamento do fio quântico mudando, assim, a quantidade de níveis preenchidos no mesmo. A direção y é a direção de confinamento do fio. 30

Figura 1.4 - (a) Gráfico experimental da condutância como função do potencial V_g aplicado aos eletrodos que formam o fio. Retirado da referência (8). (b) Gráfico da condutância G (em unidades de $2e^2/h$) em um fio quântico para uma temperatura $T > 0$ calculada em um modelo de partículas independentes. O gráfico em (c) representa a transcondutância (em unidades de $2e^2/h$ por Volt) que nada mais é que a derivada da condutância com relação ao potencial V_g 31

Figura 1.5 - Gráfico experimental mostrando a anomalia 0.7 e a sua evolução para o platô $0.5G_0$ a medida que o campo magnético aumenta. Isto indica que a anomalia 0.7 surge devido a efeitos de muitos corpos dependente de spin. Figura retirada da referência (12). 32

Figura 1.6 - (a) Gráfico esquemático das subbandas variando com o campo magnético considerando que esta dependência seja dada apenas pela energia Zeeman. O ponto B_0 é onde as subbandas de spins opostos se cruzam. Conforme o potencial V_g aplicado aos eletrodos aumenta ($V_g^{(1)} < V_g^{(2)} < V_g^{(3)}$) o nível de Fermi se desloca no sentido positivo de eixo vertical (b) Comportamento da condutância em relação a variação do potencial V_g aplicado aos eletrodos para vários campos magnéticos. Este gráfico foi feito levando em consideração que a condutância seja dada pela equação 1.1 para temperatura $T > 0$. Cada curva esta deslocada em relação a sua anterior no eixo de V_g para melhor visualização das mesmas. 34

Figura 1.7 - (a) Gráfico experimental da condutância variando com relação ao potencial V_g aplicado aos eletrodos para vários campos magnéticos. (b) Mesmo gráfico da figura (a) mas agora sinalizando os pontos onde ocorrem os análogos 0.7. (c) Gráfico experimental em escala de cinza da transcondutância variando com relação ao potencial V_g e o campo magnético aplicado ao fio. Figuras adaptadas da referência (13). 35

Figura 1.8 - (a) Gráfico em escala de cores da transcondutância como função do potencial V_g aplicado aos eletrodos e do campo magnético B aplicado ao fio. Este gráfico foi obtido através do nosso modelo baseado na teoria do funcional da densidade dependente de spin e no modelo de Landauer-Büttiker para o cálculo da condutância. (b) Gráfico experimental da transcondutância retirado da referência (14). 37

Figura 2.1 - Figura esquemática de como o fio quântico é formado. A heteroestrutura crescida na direção z forma o 2DEG e os gates, na direção y , formam o fio quântico por depleção do 2DEG imediatamente abaixo deles. Em nosso modelo usamos $a = 700$ nm, $c = 24$ nm, $d = 36$ nm, $b = 70$ nm e densidade de doadores $n_d = 6 \times 10^{17}$ cm^{-3} . Adaptado da referência (7). 40

Figura 2.2 - Cálculo Autoconsistente: Uma variável na base de uma seta é necessária para determinar a variável na ponta da mesma seta. O potencial efetivo v_s e os autoestados de Kohn-Sham ϕ_i estão acoplados por 1 - equação 2.36 -, ϕ_i e a densidade de elétrons n_s estão acoplados por 2 - equação 2.37 - e finalmente n_s e v_s estão acoplados por 3 - equação 2.35. 49

Figura 2.3 - Discretização uniforme de um potencial $v(y)$ definido no intervalo $-L_y/2 < y < L_y/2$. Nos extremos, $v(-L_y/2) = v(L_y/2) = +\infty$ garantindo, assim, a condição de contorno $\varphi(-L_y/2) = \varphi(L_y/2) = 0$. A distância entre um ponto i e $i + 1$ é Δy 59

Figura 2.4 - Fio quântico conectado a dois contatos. Como os contatos têm uma dimensão infinita com relação ao fio quântico, temos um número de modos transversais contínuo nos contatos e discreto no fio quântico. No fio quântico, os modos transversais têm potencial químico μ_E para os estados $+k_x$, e μ_D para os estados $-k_x$ 60

Figura 3.1 - Gráfico em escala de cores da transcondutância como função do potencial V_g aplicado aos eletrodos e do campo magnético B na aproximação de partícula independente sem o termo zP_y . Este gráfico foi obtido a partir da relação de dispersão dada pela equação 2.12. Em uma variação -3.72 a -3.3 V de tensão aplicada nos gates temos a população de 19 subbandas. Não temos presente a anomalia 0.7 e nos pontos de cruzamentos também não vemos nenhum comportamento que caracterize os análogos 0.7. . . . 67

Figura 3.2 - Variação das seis primeiras subbandas $\epsilon_{k_x=0, n_y, n_z}^0$ como função do potencial V_g aplicado aos eletrodos na aproximação de partícula independente sem o termo zP_y , equação 2.12, para: (a) $B = 0$ T, (b) $B = 10$ T, (c) $B = 25$ T e (d) $B = 35$ T. Note a variação constante dos níveis com relação a variação do potencial V_g . Este comportamento se mantém independentemente do número de subbandas ocupadas. 68

Figura 3.3 - Gráfico em escala de cinza da transcondutância na aproximação de Hartree em função do campo magnético B e do potencial V_g aplicado aos eletrodos sem o termo zP_y . Em uma variação -3.72 a -3.3 V de tensão aplicada nos gates temos a população de 4 subbandas, mais próximo do experimento. Não temos presente a anomalia 0.7 e nos pontos de cruzamentos também não vemos nenhum comportamento que caracterize os análogos 0.7. 69

Figura 3.4 - Variação dos níveis de energia com relação ao potencial V_g aplicado aos eletrodos na aproximação de Hartree sem o termo zP_y . Cada vez que uma subbanda começa a ser populada os níveis sofrem uma mudança na variação com relação a V_g . Mas não temos nenhum comportamento diferente como desdobramento de spin devido a transição abruptas dos níveis quando estes se cruzam próximo ao nível de Fermi. 70

- Figura 3.5 - Gráfico em escala de cores da transcondutância como função de V_g e B levando em conta efeitos de troca e correlação via DFT sem o termo zP_y . Podemos ver que a separação das linhas de spin up e down ocorrida no ponto demarcado por α_0 (anomalia 0.7) é muito grande. E nos pontos de cruzamento de spins opostos α_1 , α_2 e β_1 temos descontinuidades tanto das linhas de spin up quanto spin down. Estas descontinuidades são manifestações de transições de fase ferromagnéticas no fio quântico. . . . 72
- Figura 3.6 - Gráficos da transcondutância na aproximação de (a) Hartree, e de (b) troca e correlação feitos por Berggren *et al* (26). Em (c) temos o gráfico feito por nosso programa trocando o sinal deliberadamente e erroneamente da constante B_2 da Tabela 2.50 usada na parametrização de Attacalite *et al.* do potencial de correlação. 72
- Figura 3.7 - Variação dos níveis de energia com relação ao potencial aplicado aos eletrodos levando em conta efeitos de troca e correlação sem o termo zP_y . Olhando para (a), (b), (c) e (d) vemos a evolução das subbandas com relação ao campo magnético B . Em (a) e (c) os níveis se rearranjam de forma abrupta nos pontos α_0 e α_1 caracterizando transições de fase ferromagnéticas no fio quântico. 75
- Figura 3.8 - (a) Cálculo da abertura Zeeman com a solução exata do hamiltoniano de um fio quântico infinito com confinamento parabólico tanto na direção z quanto na y (com $\hbar\omega_y = 1.85$ meV e $\hbar\omega_z = 15$ meV), retirado da referência (13). (b) Mesmo cálculo feito via nosso método de expansão das funções de onda para levar em conta o termo zP_y . Neste gráfico usamos $n_y = 26$ e $n_z = 4$ no truncamento da somatória da equação 2.16. 76
- Figura 3.9 - Gráfico em escala de cinza da transcondutância levando em conta troca e correlação via DFT e o termo zP_y no hamiltoniano. Neste gráfico temos uma concordância maior quantitativamente com o experimento. Mas os efeitos são os mesmo qualitativamente que o gráfico levando em conta troca e correlação feito sem o termo zP_y 77

Figura 3.10 -(a) Mesmo gráfico da figura 3.9 feito para uma faixa de potencial V_g entre -3.72 e -3.38 V e de campo magnético B entre 0 e 12 T. (b) Mesma figura com curvas na cor verde feitas manualmente nas regiões de cruzamento de spins opostos. (c) Gráfico experimental retirado da referência (14)	78
Figura 3.11 -Variação dos níveis de energia com relação ao potencial aplicado aos eletrodos levando em conta efeitos de troca e correlação e o termo zP_y . Olhando para (a), (b), (c) e (d) vemos a evolução das subbandas com relação ao campo magnético B . Em (a) e (c) os níveis se reorganizam de forma abrupta nos pontos α_0 e α_1 caracterizando transições de fase ferromagnéticas no fio quântico.	79
Figura 3.12 -(a) Zoom da região entre -3.65 e -3.6 da figura 3.11.c. (b) Zoom da mesma região da figura 3.10.a.	80
Figura 3.13 -(a) Zoom do primeiro cruzamento que ocorre na figura 3.10.c. (b) Figura esquemática de como os experimentais acreditam que os níveis de energia se comportam próximo ao nível de Fermi.	81
Figura 3.14 -(a) Gráfico em escala de cores da transcondutância levando em conta troca e correlação via DFT e o termo zP_y calculada à temperatura de 50 mK. As regiões com valores positivos da transcondutância estão em escala de cinza e as regiões com valores negativos estão em cor vermelha.	82
Figura 3.15 -Gráfico em escala de cores da transcondutância calculada com o coeficiente de transmissão dado pela equação 3.1, com $\hbar\omega_x \cong 0.54$ meV. Neste gráfico levamos em conta troca e correlação via DFT e o termo zP_y . As regiões com valores positivos da transcondutância estão em escala de cinza e as regiões com valores negativos estão em cor vermelha.	83

Figura 3.16 - Gráfico em escala de cores da transcondutância diminuindo os efeitos de troca (a) levando em conta o termo zP_y e (b) sem levar em conta o termo zP_y . Estes gráficos foram calculados à temperatura zero e coeficiente de transmissão dado pela equação 3.1, com $\hbar\omega_x \cong 0.27$ meV. Em (a) o fator giromagnético usado foi de $g = -0.44$ e em (b) temos $g = -2.0$. As regiões com valores positivos da transcondutância estão em escala de cinza e as regiões com valores negativos estão em cor vermelha. 85

Figura B. 1 -Sistema composto por eletrodos (placa condutora infinita) e camada de doadores (com densidade de partículas n_d). O potencial gerado por este sistema é o potencial gerado pelo sistema formado pela camada de doadores e a camada imagem (com densidade de $-n_d$). 100

Figura B. 2 -Potenciais devido à camada de doadores $\Phi_d(z)$ e à camada imagem $\Phi_{Id}(z)$. É importante salientar que estamos interessados no potencial nas região 1, 2 e 3. 100

Figura C. 1 -a) Método da Imagem: se satisfizermos as condições de contorno de um sistema composto pelo fio quântico e uma placa metálica infinita, o potencial coulombiano deste sistema pode ser representado pelo potencial de um sistema composto por fio quântico e uma carga imagem situada em um ponto b' no eixo z . b) Potencial em um certo ponto (x, y, z) devido a uma certa quantidade de cargas dq do fio e dq' da carta imagem. 106

Lista de Tabelas

Tabela 2.1 - Valores dos parâmetros usados na parametrização da energia de correlação. Retirado das referências (41) e (42). Os parâmetros D_i 's são obtidos fazendo $D_i = -A_i H_i$ e o valor de β é igual a 1,3386. . .	53
Tabela 3.1 - Valores dos parâmetros usados para fazer os gráficos desta dissertação. Temos dois valores para g : $g = -2.0$ é usado nos gráficos obtidos sem o termo zP_y e $g = -0.44$ para gráficos levando em conta o termo zP_y	65

Sumário

1	Introdução	27
1.1	Heteroestruturas semicondutoras	28
1.2	Fios quânticos	29
1.2.1	Anomalia 0.7 e análogos 0.7	31
2	Abordagem Teórica	39
2.1	Aproximação de partícula independente	39
2.1.1	Hamiltoniano zP_y	42
2.2	Teoria do funcional da densidade	45
2.2.1	Equações de Kohn-Sham	45
2.2.2	Cálculo autoconsistente	48
2.2.3	Modelo 2D da DFT para o fio quântico	50
2.2.4	Potencial de Hartree	51
2.2.5	Potencial de troca e correlação	52
2.3	Cálculo da densidade de partículas	53
2.3.1	Relação densidade/potencial químico	56
2.4	Cálculo numérico da equação de Schrödinger	57
2.5	Condutância: Fórmula de Landauer-Büttiker	60
3	Resultados e Discussões	65
3.1	Resultados sem o termo zP_y	66
3.1.1	Aproximação de partícula independente	66
3.1.2	Aproximação de Hartree	69

3.1.3	Troca e correlação	71
3.2	Inclusão do termo zP_y	75
3.2.1	Temperatura	81
3.2.2	Contato do fio quântico com os reservatórios	82
3.2.3	A anomalia 0.7 gigante	84
3.3	Pontos relevantes	86
4	Conclusões	87
	Referências	89
	Apêndice A	95
	Apêndice B	99
	Apêndice C	105

Capítulo 1

Introdução

O nome Spintrônica (*Spintronics* em Inglês) surge em 1996 como uma acrografia de “*SPIN TRansport eletrONICS*” o nome de um programa da *U.S. Defense Advanced Research Projects Agency* (DARPA) (1). Este programa foi criado para desenvolver memórias magneto-resistivas e sensores, ambos usando dispositivos de Magneto Resistência Gigante (GMR - Giant Magnetoresistance) e de tunelamento dependente de spin (1). O efeito de GMR foi descoberto por Albert Fert (2) e Peter Grünberg (3) no final dos anos 80 e rendeu a esses dois nomes o prêmio Nobel de Física de 2007 (4).

Spintrônica designa hoje uma nova área da física da matéria condensada responsável por estudar transporte, coerência e dinâmica de spins em metais e semicondutores. Hoje, depois de aproximadamente 20 anos de pesquisa nesta área, temos como exemplo de dispositivos, frutos da spintrônica em metais, os discos rígidos magnéticos e as MRAMs (*Magnetic Random Access Memories*). Como exemplo de um dispositivo, resultado da spintrônica em semicondutores, temos o Spin-FET (*Spin Field Effect Transistor*) proposto por Datta e Das em 1990 (5) mas que somente agora, em 2009, temos uma possível evidência da sua realização experimental (6).

Nesta dissertação estaremos interessados na spintrônica de semicondutores onde estudaremos propriedades da magnetocondutância em fios quânticos interagentes. Nas próximas seções iremos falar sobre as heteroestruturas semicondutoras, os fios quânticos e a anomalia e análogos 0.7. Em todas estas seções iremos abordar os principais trabalhos experimentais e teóricos relevantes para esta dissertação.

1.1 Heteroestruturas semicondutoras

Os sistemas estudados em spintrônica em geral são formados crescendo amostras com camadas de diferentes materiais. Uma das técnicas de crescimento mais usada nestes casos é a de crescimento epitaxial por feixe molecular (MBE, do Inglês, *Molecular Beam Epitaxy*) que garante um alto grau de pureza e precisão das amostras.

Nos semicondutores, o intuito de crescer amostras com camadas de diferentes materiais é por exemplo formar poços quânticos para confinar os elétrons nas interfaces destas camadas. Em uma heteroestrutura semicondutora de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ temos uma fina camada de GaAs no meio de duas camadas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (figura 1.1). Nesta última camada uma porcentagem x de átomos de gálio é aleatoriamente trocada por átomos de alumínio. Além das camadas citadas, também temos camadas com dopantes do tipo n que fornecem os elétrons que ocuparão os níveis discretos do poço quântico.

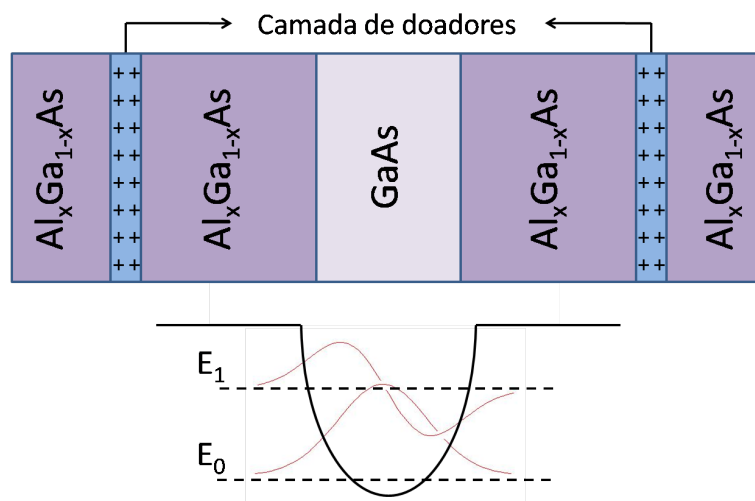


Figura 1.1 – Heteroestrutura semicondutora de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. A diferença de energia entre a banda de valência e a banda de condução da liga binária GaAs é menor que a da liga ternária AlGaAs. Desta forma, forma-se um poço quântico nas interfaces destas camadas. Os níveis discretos do poço quântico são preenchidos pelos elétrons fornecidos pelas camadas de doadores.

A diferença de energia entre a banda de valência e a banda de condução do AlGaAs é maior que a do GaAs e assim, forma-se um poço quântico entre as interfaces destes materiais. Os níveis discretos deste poço quântico são preenchidos pelos elétrons fornecidos pelas camadas de doadores. Com isto, formamos o chamado gás de elétrons bidimensional

(2DEG - *Two-dimensional Electron Gas*).

Confinando o 2DEG em mais uma ou duas direções teremos, respectivamente, o fio quântico, um sistema quase unidimensional, e o ponto quântico, um sistema quase zero-dimensional. Estes confinamentos no 2DEG podem ser feitos estruturalmente ou eletrostaticamente através de diferenças de potenciais aplicadas a eletrodos externos.

1.2 Fios quânticos

Os fios quânticos estudados nesta dissertação serão aqueles formados pelo confinamento do 2DEG através de diferenças de potencial aplicada a eletrodos. De uma forma mais detalhada, os eletrodos tem uma geometria chamada de *split gate* que nada mais é que duas placas metálicas com potencial $V_g < 0$ separadas por uma certa distância, ver figura 1.2. Os elétrons irão ser repelidos abaixo destes eletrodos formando assim o fio quântico.

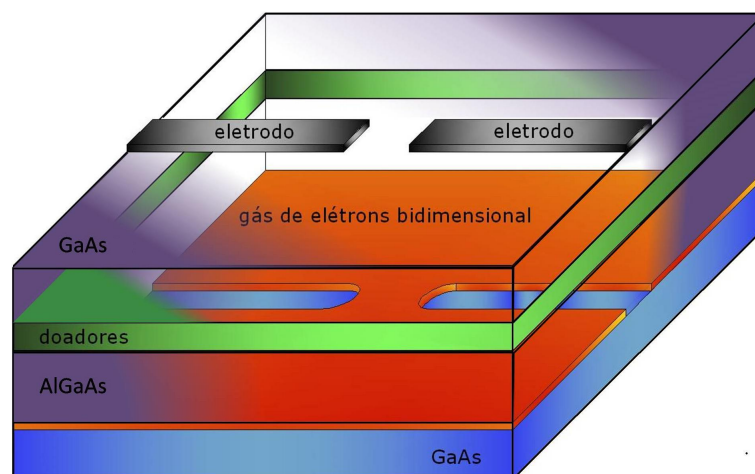


Figura 1.2 – Figura esquemática da geometria de *split gate*. A heteroestrutura semicondutora forma o gás de elétrons bidimensional na interface GaAs/AlGaAs. Aplicando uma voltagem negativa V_g nos gates localizados na superfície da heteroestrutura confinamos os elétrons que estão abaixo deles e assim formamos o quantum wire.

O potencial eletrostático gerado pela geometria de *split gate*, que confina os elétrons no plano do 2DEG, se assemelha muito a um potencial parabólico (7). Aumentando ou diminuindo negativamente a tensão V_g aplicada aos eletrodos geramos, respectivamente, um potencial mais ou menos confinante. Desta forma, em um regime de potencial químico

constante, a mudança em V_g implica na mudança da densidade de elétrons do fio. Este processo está representado na figura 1.3. O aumento de V_g gera um potencial mais confinante, com isto teremos menos níveis preenchidos diminuindo assim a densidade de elétrons no fio.

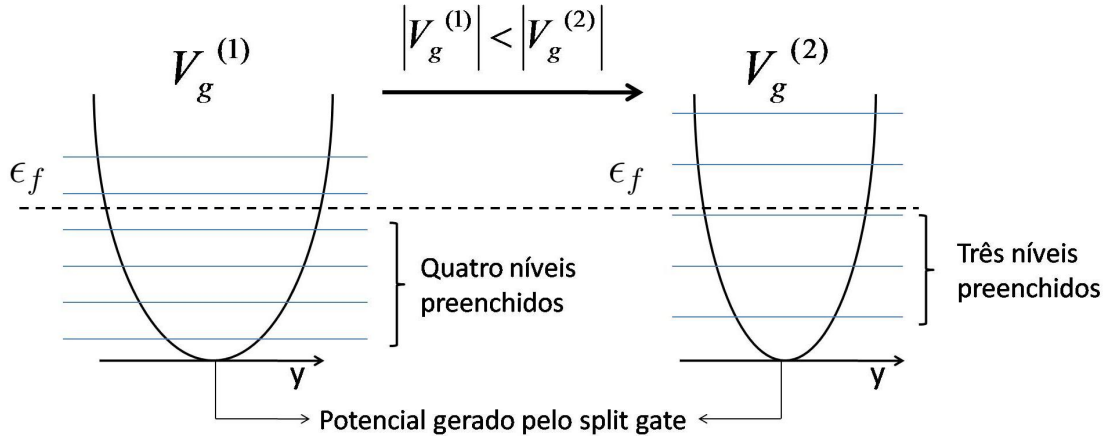


Figura 1.3 – Figura esquemática do potencial gerado pelo *split gate* no plano do 2DEG. Quando aumentamos negativamente a tensão aplicada nos eletrodos do *split gate* aumentamos o confinamento do fio quântico mudando, assim, a quantidade de níveis preenchidos no mesmo. A direção y é a direção de confinamento do fio.

Fios quânticos formados pela geometria de *split gate* são amplamente estudados deste 1988 quando Van Wees et al. (8) e Wharam et al. (9), independentemente, reportaram pela primeira vez medidas da condutância em fios quânticos como função da tensão V_g aplicada aos eletrodos. Na figura 1.4.a temos o gráfico experimental de van Wees et al. da condutância como função do potencial V_g aplicado aos eletrodos. Estes resultados mostraram que a condutância varia em platôs de $2e^2/h$, ou seja

$$G = NG_0, \quad (1.1)$$

onde $G_0 = \frac{2e^2}{h}$ é o quantum de condutância e $N = \sum_i \theta(\epsilon_f - \epsilon_i)$ é o número de modos transversais abertos (números de níveis discretos ϵ_i abaixo do nível de Fermi ϵ_f) no fio*. O fator 2 em G_0 é devido à degenerescência de spin que é quebrada quando um campo magnético é aplicado. Neste caso, os platôs da condutância aparecem em múltiplos de

*Para temperatura $T > 0$ o número de modos transversais abertos é dado por $N = \sum_i f(\epsilon_i)$, onde $f(\epsilon_i)$ é a função de Fermi

$G_0/2$.

Na figura 1.4.b temos um gráfico esquemático do comportamento da condutância em relação a V_g . Este gráfico foi calculado a partir da equação 1.1 e de um modelo de partícula independente considerando um confinamento parabólico na direção y . Na figura 1.4.c temos representada a transcondutância, que nada mais é que a derivada da condutância com relação a V_g . Sempre que uma subbanda começa a ser preenchida temos uma transição de um platô para outro no gráfico da condutância e um pico no gráfico da transcondutância.

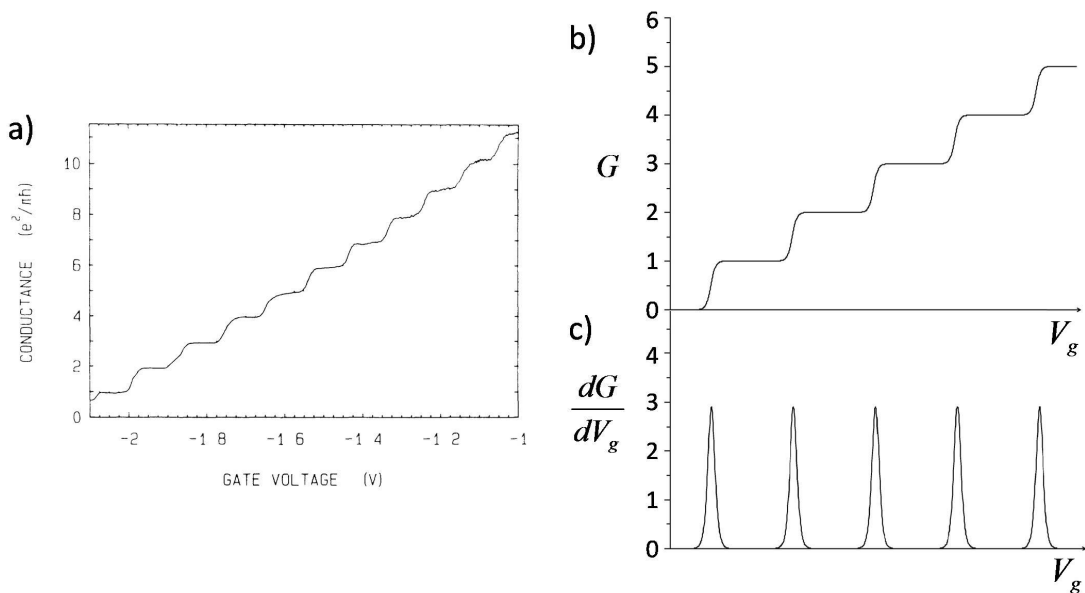


Figura 1.4 – (a) Gráfico experimental da condutância como função do potencial V_g aplicado aos eletrodos que formam o fio. Retirado da referência (8). (b) Gráfico da condutância G (em unidades de $2e^2/h$) em um fio quântico para uma temperatura $T > 0$ calculada em um modelo de partículas independentes. O gráfico em (c) representa a transcondutância (em unidades de $2e^2/h$ por Volt) que nada mais é que a derivada da condutância com relação ao potencial V_g .

1.2.1 Anomalia 0.7 e análogos 0.7

Comparando os gráficos das figuras 1.4.a e 1.4.b vemos que o comportamento em platôs da condutância é muito bem explicado por uma teoria de partículas não interagentes. A equação 1.1 pode ser deduzida sem levar em conta nenhuma interação de muitos corpos entre os elétrons do fio quântico. Esta interpretação foi levada adiante teoricamente e

experimentalmente até o ano de 1993. Em 1994 Ogata et al. (10), usando uma teoria de Tomonaga-Luttinger modificada, predisseram um decréscimo no valor da quantização da condutância, ou seja $G = k(2e^2/h)$, onde $k \approx 0.7$. No ano seguinte, medidas feitas por Tarucha et al. (11) constataram este decréscimo no platô da condutância e surpreendentemente para o mesmo valor de k . Até então, tudo indicava que teoria e experimento estavam em acordo com este comportamento da condutância.

Mas em 1996 Thomas et al. (12) mostraram experimentalmente que na verdade, diferentemente de Ogata et al. e Tarucha et al., a condutância apresentava, além do platô em $G = G_0$, um platô adicional em $G = 0.7G_0$. Neste mesmo artigo Thomas et al. concluíram que esta anomalia poderia estar relacionada com efeitos de interação de muitos corpos dependente de spin. As evidências que o levaram a esta conclusão foram: (i) a observação do aumento do fator giromagnético $|g|$ em relação ao decréscimo de modos transversais abertos; (ii) a nítida evolução do platô adicional de $0.7G_0$ para $0.5G_0$ quando um campo magnético era aplicado paralelamente ao fio. Na figura 1.5 temos o gráfico experimental mostrando a anomalia 0.7 e sua evolução para o platô a $0.5G_0$ quando a medida que o campo aumenta. Desta forma, surge em 1996 a chamada anomalia 0.7. O curioso é que no artigo de 1988 de van Wees (8) a anomalia 0.7 já aparecia em gráficos da condutância, mas até 1996 ninguém tinha chamado a atenção para ela.

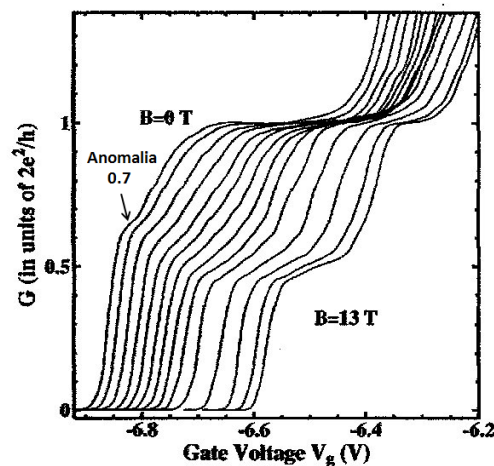


Figura 1.5 – Gráfico experimental mostrando a anomalia 0.7 e a sua evolução para o platô $0.5G_0$ a medida que o campo magnético aumenta. Isto indica que a anomalia 0.7 surge devido a efeitos de muitos corpos dependente de spin. Figura retirada da referência (12).

Além da anomalia 0.7, o mesmo grupo de Thomas et al. mostrou em 2003 (Graham et al. (13)) que em regiões de altos campos magnéticos próximas aos pontos de cruzamentos de subbandas de spins opostos, a condutância também exibiu um comportamento que não era descrito pela equação 1.1. Antes de entrar em detalhe sobre o que Graham et al. mostraram em 2003, vamos ver o que esta equação nos diz a respeito da condutância nas regiões onde temos o cruzamento de subbandas de spins opostos.

Consideremos que a dependência dos níveis de energia com relação ao campo magnético seja dada apenas pela energia Zeeman, ver figura 1.6.a. O ponto B_0 é onde acontece o primeiro cruzamento entre subbandas de spins opostos. Na figura 1.6.b temos o gráfico da condutância variando com V_g para alguns campos magnéticos $B < B_0$, $B > B_0$ e $B = B_0$, representado pela curva vermelha. Para campos menores que B_0 o platô a $G = 2e^2/h$ está marcado com um triângulo azul e é devido ao preenchimento da subbanda $|0 \downarrow\rangle^\dagger$. Já o platô a $G = 3e^2/h$ está marcado com um quadrado vermelho e é devido ao preenchimento da subbanda $|1 \uparrow\rangle$.

Na região $B < B_0$, a subbanda $|0 \downarrow\rangle$ se aproxima da $|1 \uparrow\rangle$ a medida que o campo aumenta, isto faz com que o platô representado pelo triângulo azul diminua em largura[‡] também quando o campo aumenta. Para campo magnético $B = B_0$ temos as subbandas $|0 \downarrow\rangle$ e $|1 \uparrow\rangle$ degeneradas. Sendo assim, a condutância para este campo magnético não apresenta o platô em $G = 2e^2/h$. Para $B > B_0$, como estas subbandas não estão mais degeneradas este platô ressurge, representado agora pelo quadrado vermelho pois é devido agora ao preenchimento da subbanda $|1 \uparrow\rangle$ e não mais de $|0 \downarrow\rangle$.

Na figura 1.7.a temos um gráfico experimental da condutância de um fio quântico para uma faixa de campo magnético entre 6.6 e 10.6 T retirado da referência (13). Da mesma forma que na figura 1.6.b, esta é a faixa de campo onde há o cruzamento entre subbandas de spins opostos. Na figura 1.7.b temos o mesmo gráfico da figura 1.7.a mas com regiões marcadas com triângulos e quadrados para nos ajudar na descrição do que está acontecendo. Tal como na figura 1.6.b, o platô em $G = 2e^2/h$ para campos antes do cruzamento

[†]A notação $|n_y, \sigma\rangle$ representa o autoestado de número quântico orbital n_y e de spin σ .

[‡]A largura dos platôs é dada diretamente pela diferença de energia entre as subbandas. Quanto maior a diferença de energia entre duas subbandas consecutivas maior será a diferença entre os valores de V_g que começamos a popular estas subbandas.

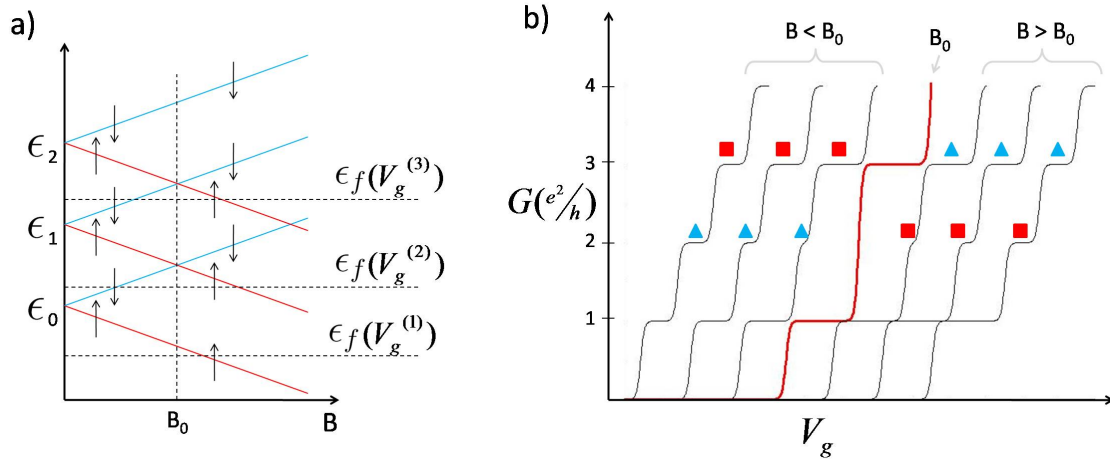


Figura 1.6 – (a) Gráfico esquemático das subbandas variando com o campo magnético considerando que esta dependência seja dada apenas pela energia Zeeman. O ponto B_0 é onde as subbandas de spins opostos se cruzam. Conforme o potencial V_g aplicado aos eletrodos aumenta ($V_g^{(1)} < V_g^{(2)} < V_g^{(3)}$) o nível de Fermi se desloca no sentido positivo de eixo vertical (b) Comportamento da condutância em relação a variação do potencial V_g aplicado aos eletrodos para vários campos magnéticos. Este gráfico foi feito levando em consideração que a condutância seja dada pela equação 1.1 para temperatura $T > 0$. Cada curva está deslocada em relação a sua anterior no eixo de V_g para melhor visualização das mesmas.

é representado pelo triângulo azul. Na região onde ocorre o cruzamento ele some e depois reaparece para campos maiores, só que representado pelo quadrado vermelho. Também como antes, o platô em $G = 3e^2/h$ para campos antes do cruzamento é representado pelo quadrado vermelho, e depois do cruzamento é representado pelo triângulo azul. Até aí está tudo similar com o que tínhamos na figura 1.6.b. Na figura 1.7, no entanto, além dos platôs em $G = 2e^2/h$ e $G = 3e^2/h$, na região marcada por uma elipse vermelha temos um pequeno platô que surge em $G = 3e^2/h$ e evolui até $G = 2e^2/h$.

Na figura 1.7.c temos o gráfico em escala de cores da transcondutância como função de V_g e B . Neste gráfico a cor branca representa as regiões onde a transcondutância é nula e as cores em diferentes tons de cinza representam as regiões onde a transcondutância é positiva. A região de cruzamento graficada na figura 1.7.b é representada por α_1 na figura 1.7.c. Nesta figura podemos ver que o mesmo tipo de comportamento acontece sempre que temos cruzamento entre subbandas de spins opostos, como exemplo os pontos α_2 e β_1 . Este tipo de comportamento da condutância nestes cruzamentos recebeu o nome de análogos 0.7 (13). Além dos análogos, podemos ver na figura 1.7.c a anomalia 0.7 que

está representada por α_0 .

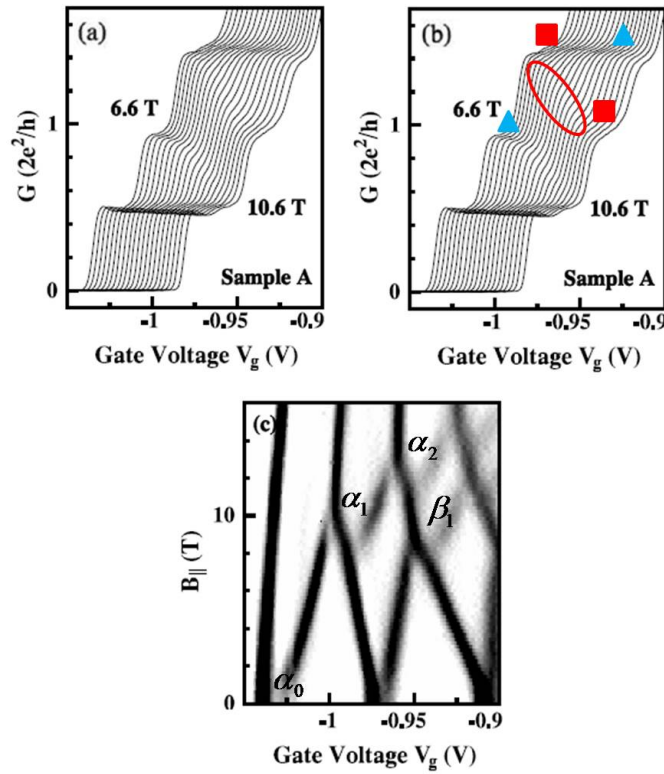


Figura 1.7 – (a) Gráfico experimental da condutância variando com relação ao potencial V_g aplicado aos eletrodos para vários campos magnéticos. (b) Mesmo gráfico da figura (a) mas agora sinalizando os pontos onde ocorrem os análogos 0.7. (c) Gráfico experimental em escala de cinza da transcondutância variando com relação ao potencial V_g e o campo magnético aplicado ao fio. Figuras adaptadas da referência (13).

Muitos trabalhos estudando a anomalia e os análogos 0.7 foram publicados em anos recentes (14)-(17) e hoje em dia sabemos através de experimentos que a anomalia 0.7 não é universal. Na verdade o platô adicional varia de $0.6G_0$ a $0.9G_0$ conforme mudanças na temperatura, comprimento ou largura do fio (18). Devido à complexidade do comportamento da anomalia e dos análogos 0.7, ainda hoje, não existe uma teoria completa que explique tal comportamento por inteiro (19).

Os principais trabalhos teóricos que tentam explicar a anomalia ou os análogos 0.7 ou ambos se encaixam dentro de três modelos: (i) modelo de separação de spin aumentada pela interação de troca (20)-(27), (ii) modelo de Kondo (28)-(30) e (iii) modelo de líquido de Luttinger (31).

No modelo de separação de spin aumentada pela interação de troca temos os modelos

fenomenológico de Bruus et al. (20) e Reilly et al. (21)-(23), e o modelo baseado na teoria do funcional da densidade dependente de spin de Berggren et al. (24)-(27). Dentro modelo de Kondo temos os trabalhos de Cronenwett et al. (28) e Meir et al. (29)-(30). No modelo de líquido de Luttinger temos o trabalho de Maslov et al. (31).

Nesta dissertação propomos um modelo baseado: (i) na teoria do funcional da densidade dependente de spin (SDFT) como o proposto por Berggren et al. no cálculo da estrutura eletrônica e (ii) na formulação de Landauer-Büttiker para o cálculo da condutância. Trabalhos anteriores do grupo (32)-(33) em magnetotransporte em 2DEGs e transições de fase de ferromagnetismo de efeito Hall quântico via SDFT tiveram uma boa concordância com experimentos e, desta forma, motivam o uso deste modelo em fios quânticos interagentes.

Nosso modelo apresenta várias aproximações em relação ao sistema físico real: (i) consideramos um fio quântico infinito; (ii) usamos os autoestados de Kohn-Sham como autoestados reais do problema; (iii) calculamos a condutância para nosso modelo interagente através da equação de Landauer-Büttiker, que é formulada para um modelo de partículas independentes. Apesar destas várias aproximações, nossos resultados apresentam uma boa concordância com o experimento. Por exemplo, na figura 1.8.a temos o gráfico em escala de cores da transcondutância obtido teoricamente através do nosso modelo. Nele conseguimos reproduzir quase todas as características do gráfico experimental da figura 1.8.b.

Neste capítulo fizemos uma introdução sobre o sistema estudado (fios quânticos) bem como a anomalia e os análogos 0.7 que serão o assunto central deste trabalho. No capítulo 2 defino o modelo teórico na aproximação de partícula independente e o modelo interagente baseado em spin DFT. Nele também abordo os principais detalhes do cálculo numérico do modelo e o cálculo da condutância via formalismo de Landauer-Büttiker. No capítulo 3 apresento e discuto os resultados obtidos neste trabalho propondo uma explicação para os efeitos anômalos presentes nos gráficos da transcondutância. No último capítulo faço as conclusões deste trabalho resumindo os principais resultados obtidos e salientando a simplicidade do nosso modelo e suas deficiências.

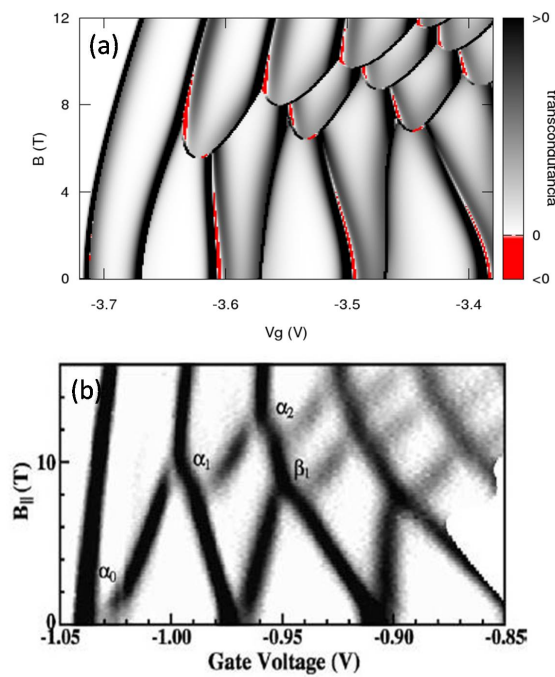


Figura 1.8 – (a) Gráfico em escala de cores da transcondutância como função do potencial V_g aplicado aos eletrodos e do campo magnético B aplicado ao fio. Este gráfico foi obtido através do nosso modelo baseado na teoria do funcional da densidade dependente de spin e no modelo de Landauer-Büttiker para o cálculo da condutância. (b) Gráfico experimental da transcondutância retirado da referência (14).

Capítulo 2

Abordagem Teórica

Neste capítulo apresentamos toda a teoria necessária para definir nosso modelo e estudar a magnetocondutância em fios quânticos. Na seção 2.1 definimos nosso Hamiltoniano na aproximação de partícula independente, determinando os autovalores e autovetores da equação de Schrödinger independente do tempo. Na seção 2.2 introduzimos os efeitos de muitos corpos em nosso problema através da teoria do funcional da densidade (DFT - *Density Functional Theory*) na aproximação de densidade de spin local (LSDA - *Local Spin Density Approximation*). Nesta começamos falando sobre os teoremas de Hohenberg-Kohn e as equações de Kohn-Sham e logo em seguida definimos nosso potencial de Hartree e o funcional de troca e correlação. Nas seções 2.3 e 2.4 mostramos respectivamente como o cálculo da densidade é feito em nosso modelo e como tratamos a equação de Schrödinger unidimensional numericamente. Finalizando, na seção 2.5 definimos a fórmula de Landauer-Büttiker no regime de resposta linear usada aqui para o cálculo da condutância nos fios quânticos.

2.1 Aproximação de partícula independente

O sistema estudado é um gás de elétrons confinado em uma direção através de uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs e em outra direção através de duas placas metálicas

com um potencial $V_g < 0$ aplicados a elas. Estas placas estão situadas acima do 2DEG e entre elas existe uma separação onde logo abaixo irá se formar o fio quântico, ver figura 2.1. Paralelamente ao fio, existe um campo magnético aplicado.

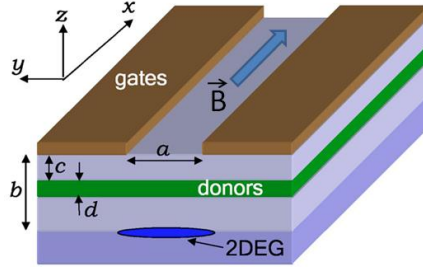


Figura 2.1 – Figura esquemática de como o fio quântico é formado. A heteroestrutura crescida na direção z forma o 2DEG e os gates, na direção y , formam o fio quântico por depleção do 2DEG imediatamente abaixo deles. Em nosso modelo usamos $a = 700$ nm, $c = 24$ nm, $d = 36$ nm, $b = 70$ nm e densidade de doadores $n_d = 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Adaptado da referência (7).

Com o sistema físico definido, podemos agora escrever nosso Hamiltoniano. Na aproximação de massa efetiva (34)-(36) e de partícula independente temos

$$H(x, y, z) = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{(p_y + eA_y)^2}{2m^*} + \frac{p_z^2}{2m^*} + v_e(y, z) + v_{Zeeman}, \quad (2.1)$$

onde $e > 0$ é a carga do elétron e m^* é a massa efetiva. Na equação acima usamos o gauge de Landau $\vec{A} = (0, A_y, 0)$, onde $A_y = -Bz$, para introduzir o campo magnético no Hamiltoniano. O potencial v_{Zeeman} é dado por

$$v_{Zeeman} = g\mu_B B\sigma, \quad (2.2)$$

onde g é o fator giromagnético, μ_B é o magneton de Bohr e σ representa a componente do spin do elétron ao longo do campo B , iremos usar $+1/2$ para spin para cima (up) e $-1/2$ para spin para baixo (down). O potencial de confinamento $v_e(y, z)$ é dado por

$$v_e(y, z) = v_y(y) + v_z(z), \quad (2.3)$$

onde

$$v_y(y) = -e\Phi_{sg}(y) - e\Phi_{dg} - e\Phi_S, \quad (2.4)$$

$$v_z(z) = \frac{1}{2}m^*\omega_z^2z^2 \quad (2.5)$$

onde ω_z é a frequência de confinamento na direção z e $e\Phi_S = -0.8$ eV é o potencial eletrostático gerado pela barreira Schottky que surge devido ao contato entre os eletrodos e a heteroestrutura semicondutora. O termo $\Phi_{sg}(y)$ é o potencial eletrostático devido aos eletrodos e o termo Φ_{dg} é devido à camada de doadores e à quantidade de carga que ela induz nos eletrodos. Estes dois potenciais são dados por

$$\Phi_{sg}(y) = V_g \left\{ 1 - \frac{1}{\pi} \left[\arctan \left(\frac{a/2 - y}{b} \right) + \arctan \left(\frac{a/2 + y}{b} \right) \right] \right\}, \quad (2.6)$$

$$\Phi_{dg} = \frac{e}{\epsilon_0\epsilon_r} n_d d (c + d/2), \quad (2.7)$$

onde V_g , ϵ_0 e ϵ_r são a voltagem aplicada aos eletrodos e o coeficiente dielétrico do vácuo e do GaAs. Os parâmetros a , b , c , d e n_d estão definidos na figura 2.1 e as deduções das equações 2.6 e 2.7 estão em detalhes nos Apêndices A e B respectivamente.

Substituindo a equação 2.5 e A_y na equação 2.1 ficamos com o seguinte Hamiltoniano

$$H(x, y, z) = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} + v_y + \frac{p_z^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\Omega_z^2z^2 - \omega_c z p_y + v_{Zeeman}, \quad (2.8)$$

onde $\omega_c = eB/m^*$ é a frequência cíclotron e $\Omega_z = \sqrt{\omega_z^2 + \omega_c^2}$. Com o Hamiltoniano definido, podemos escrever e resolver a equação de Schrödinger independente do tempo,

$$H(\vec{r})\Psi_N(\vec{r}) = \epsilon_N\Psi_N(\vec{r}),$$

$$[H_0(x, y, z) - \omega_c z p_y] \Psi_{k_x, n_y, n_z}(\vec{r}) = \epsilon_{k_x, n_y, n_z} \Psi_{k_x, n_y, n_z}(\vec{r}), \quad (2.9)$$

onde

$$H_0 \equiv \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} + v_y + \frac{p_z^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\Omega_z^2 z^2 + v_{Zeeman}. \quad (2.10)$$

Na equação 2.9 o termo H_0 tem as direção x , y e z desacopladas, enquanto que o termo $-\omega_c z p_y^*$ acopla as direções y e z . Por motivos didáticos iremos desconsiderar este termo por hora, um passo que torna nosso problema muito mais simples de ser resolvido. Desta forma, ficamos com a seguinte equação

$$H_0(x, y, z)\Psi_{k_x, n_y, n_z}^0(x, y, z) = \epsilon_{k_x, n_y, n_z}^0 \Psi_{k_x, n_y, n_z}^0(x, y, z),$$

$$\left(\frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} + v_y + \frac{p_z^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\Omega_z^2 z^2 + v_{Zeeman} \right) \Psi_{k_x, n_y, n_z}^0(\vec{r}) = \epsilon_{k_x, n_y, n_z}^0 \Psi_{k_x, n_y, n_z}^0(\vec{r}). \quad (2.11)$$

A equação 2.11 é exatamente solúvel e seus autovalores e autovetores são, respectivamente

$$\epsilon_{k_x, n_y, n_z}^0 = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \epsilon_{n_y} + \hbar\Omega_z \left(n_z + \frac{1}{2} \right), \quad (2.12)$$

$$\Psi_{k_x, n_y, n_z}^0(x, y, z) = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x}} \varphi_{n_y}(y) \frac{e^{-\frac{\Omega_z}{2\omega_c} \frac{z^2}{l_0^2}} H^{n_z} \left(\sqrt{\frac{\Omega_z}{\omega_c}} \frac{z}{l_0} \right)}{\left[2^{n_z} n_z! \sqrt{\pi} l_0 \sqrt{\frac{\omega_c}{\Omega_z}} \right]}, \quad (2.13)$$

onde L_x é o comprimento do fio, $H^i(r)$ é o polinômio de Hermite de i -ésima ordem e $l_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m^*\omega_c}}$ é o comprimento magnético. As equações 2.12 e 2.13 são o conjunto de solução para nosso sistema na aproximação de partícula independente sem levar em conta o termo zP_y . A parte y do problema é tratada numericamente.

2.1.1 Hamiltoniano zP_y

Para resolver a equação 2.9 vamos expandir os autovetores $\Psi(\vec{r})$ em termos de $\Psi_{k_x, n_y, n_z}^0(\vec{r})$, ou seja

*No decorrer do texto iremos nos referenciar a este termo como zP_y .

$$\Psi_{k_x,p,q}(\vec{r}) = \sum_{n_y,n_z} C_{n_y,n_z}^{p,q} \Psi_{k_x,n_y,n_z}^0(\vec{r}) \quad (2.14)$$

Observemos que nesta expansão a soma é feita apenas nos números quânticos n_y e n_z , pois o termo zPy acopla apenas as partes dependentes de y e z , ou seja, a parte em x da função de onda permanece inalterada. Substituindo a equação 2.14 na equação 2.9 e multiplicando os dois lados da equação por $\Psi_{k'_x,n'_y,n'_z}^{0*}(\vec{r})$ ficamos com[†]

$$\sum_{n_y,n_z} C_{n_y,n_z}^{p,q} \langle k'_x, n'_y, n'_z | (H_0 - \omega_c z p_y) | k_x, n_y, n_z \rangle = \sum_{n_y,n_z} C_{n_y,n_z}^{p,q} \epsilon_{k_x,p,q} \langle k'_x, n'_y, n'_z | k_x, n_y, n_z \rangle \quad (2.15)$$

$$\sum_{n_y,n_z} C_{n_y,n_z}^{p,q} \left[\left(\epsilon_{k_x,n_y,n_z}^0 - \epsilon_{k_x,p,q} \right) \delta_{n'_y,n_y} \delta_{n'_z,n_z} + W_{n'_y,n_y;n'_z,n_z} \right] = 0 \quad (2.16)$$

onde $W_{n'_y,n_y;n'_z,n_z} \equiv -\langle k'_x, n'_y, n'_z | \omega_c z p_y | k_x, n_y, n_z \rangle$. Para simplificar o problema podemos escrever z em termos de operadores criação a_z^\dagger e destruição a_z . Desta forma definimos

$$z = \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \Omega_z}} \hat{z}, \quad (2.17)$$

$$\hat{z} = \frac{(a_z^\dagger + a_z)}{\sqrt{2}}, \quad (2.18)$$

onde na equação 2.17 reescrevemos z em função de um operador adimensional \hat{z} e na equação 2.18 definimos \hat{z} em função dos operadores criação e destruição. Usando as equações 2.17 e 2.18 e as relações dos operadores criação e destruição[‡] reescrevemos $W_{n'_y,n_y;n'_z,n_z}$ como

$$W_{n'_y,n_y;n'_z,n_z} = -\omega_c \sqrt{\frac{\hbar}{2m^* \Omega_z}} \langle n'_y | p_y | n_y \rangle (\sqrt{n_z + 1} \delta_{n'_z,n_z+1} + \sqrt{n_z} \delta_{n'_z,n_z-1}) \quad (2.19)$$

Fazendo uma análise de paridade no termo $\langle n'_y | p_y | n_y \rangle$ vemos que este será não nulo

[†]Deste ponto em diante iremos usar a notação de Dirac: $\Psi_{k_x,n_y,n_z}^0 = \langle \vec{r} | k_x, n_y, n_z \rangle$.

[‡] $a_z^\dagger | n_z \rangle = \sqrt{n_z + 1} | n_z + 1 \rangle$ e $a_z | n_z \rangle = \sqrt{n_z} | n_z - 1 \rangle$.

somente se as funções de onda $\langle n'_y |$ e $|n_y\rangle$ tiverem paridades diferentes, ou seja, se $n'_y = n_y \pm i$, onde $i = 1, 3, 5 \dots$. Desta forma, voltando para a equação (2.16) teremos uma matriz com os termos $(\epsilon_{k_x, n_y, n_z}^0 - \epsilon_{k_x, p, q}) \delta_{n'_y, n_y} \delta_{n'_z, n_z}$ na diagonal e os termos $W_{n'_y, n_y; n'_z, n_z}$ fora da diagonal misturando subbandas de n'_y e n_y diferentes e bandas de n'_z e n_z vizinhos.

Ainda olhando para a equação 2.16 temos um somatório infinito em n_y e n_z , ou seja, isto nos dá uma matriz de ordem infinita. Com isso, teremos que truncar este somatório em um certo valor de n_y e n_z para podermos diagonalizá-la. Neste ponto é que se faz importante a escolha do gauge em nosso problema.

Caso tivéssemos escolhido o gauge $\vec{A} = (0, 0, By)$ o termo que acopla as direções y e z seria $+\omega_c y p_z$ ao invés de $-\omega_c z p_y$. Como em nosso modelo o confinamento na direção z é sempre maior (“mais confinado”) que na direção y [§] e como sabemos que quanto maior o confinamento, menor é o operador posição na respectiva direção[¶] temos que $|\omega_c y p_z| > |\omega_c z p_y|$. Desta forma, a escolha do gauge $\vec{A} = (0, -Bz, 0)$ é a melhor em relação à eficiência no cálculo numérico, pois necessitamos de um menor número de níveis n_y e n_z no truncamento da soma de (2.16) para obter uma boa aproximação.

No processo de diagonalização da matriz dada pela equação 2.16, a escolha do ordenamento da base se faz importante para reduzir o tempo de execução do programa. Para qualquer escolha do valor de n_y e n_z para o truncamento do somatório sempre existe um ordenamento da base que resulta em uma matriz do tipo matriz de banda (tridiagonal, pentadiagonal, etc). Para diagonalizar esta matriz usamos a função *zheevx* presente na biblioteca do Lapack^{||}. Esta função calcula os autovalores e autovetores de qualquer matriz hermitiana complexa. Desta maneira, fica concluído o cálculo para a estrutura eletrônica do problema do fio quântico na aproximação de partícula independente.

[§]Isto é de total acordo com o sistema experimental. Como o confinamento na direção z é feito estruturalmente, ele geralmente é maior que o confinamento gerado pelos eletrodos.

[¶]Podemos ver isto na equação 2.17 onde temos explicitamente $z \propto \frac{1}{\sqrt{\Omega_z}}$.

^{||}É importante salientar que todos os programas usados nesta dissertação foram desenvolvidos por mim (com exceção de rotinas usuais de diagonalização de matrizes).

2.2 Teoria do funcional da densidade

Os efeitos de muitos corpos são importantes para explicar corretamente as propriedades de condutância nas regiões onde há cruzamento de níveis de spins opostos. A DFT nos permite, através da sua implementação via equações de Kohn-Sham, levar em conta estes efeitos (interação de Coulomb) entre os elétrons de sistemas quânticos.

Nas últimas décadas, a DFT tem sido um dos métodos mais utilizados para cálculos de propriedades de sistemas eletrônicos complexos. Um dos principais motivos deste sucesso é a eficiência no tempo de resolução computacional das equações de Kohn-Sham. Esta eficiência computacional é devido ao fato de a DFT mapear um problema de muitos corpos, com interação coulombiana, em um problema de uma única partícula sujeita a um potencial efetivo, sem interação. Esta é a base da formulação de Kohn-Sham na DFT.

2.2.1 Equações de Kohn-Sham

O Hamiltoniano de um gás de elétrons interagentes sujeito a um potencial externo é dado por

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V}, \quad (2.20)$$

onde

$$\hat{T} = \sum_i^N \left(-\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} \right), \quad (2.21)$$

$$\hat{U} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (2.22)$$

$$\hat{V} = \sum_i^N v(\vec{r}_i), \quad (2.23)$$

são, respectivamente, os operadores energia cinética, de Coulomb e do potencial externo.

A densidade de partículas de um sistema de muitos corpos é dada por

$$n(\vec{r}) = N \int d^3r_2 d^3r_3 \dots d^3r_N \Psi^*(r, r_2, \dots, r_N) \Psi(r, r_2, \dots, r_N), \quad (2.24)$$

onde $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ é a função de muitos corpos do sistema.

Um dos teoremas de Hohenberg-Kohn (37) nos garante que a equação 2.24 pode ser invertida de forma que, dada a densidade do estado fundamental (GS - Ground State) n_0 é possível calcular a correspondente função de onda do GS, $\Psi_0(r_1, r_2, \dots, r_N)$. Com isto, podemos definir os autovetores $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ como um funcional da densidade do GS, $\Psi[n_0]$. Assim, todos os observáveis podem também ser escritos como um funcional de n_0 . Isto implica que a quantidade de informação em $n_0(r)$ é a mesma que em $\Psi(r)$. Desta forma, escrevendo a energia como um funcional da densidade do GS ficamos com**

$$E[n_0] = \langle \Psi[n_0] | \hat{H} | \Psi[n_0] \rangle = \langle \Psi[n_0] | \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} | \Psi[n_0] \rangle, \quad (2.25)$$

$$E[n_0] = T[n_0] + U[n_0] + V[n_0]. \quad (2.26)$$

Podemos separar a energia cinética $T[n_0]$ em dois termos $T_s[n_0]$ e $T_c[n_0]$ que representam, respectivamente, a parte não interagente e de correlação da mesma, ou seja, $T[n_0] = T_s[n_0] + T_c[n_0]$. Em $U[n_0]$ também temos a contribuição de dois termos, sendo um devido à parte de Hartree ($U_H[n_0]$) e outro devido à parte de troca e correlação ($U_{xc}[n_0]$) da interação de Coulomb, ou seja, $U[n_0] = U_H[n_0] + U_{xc}[n_0]$ ^{††}. Reescrevendo a equação 2.26 ficamos com

$$E[n_0] = T_s[n_0] + U_H[n_0] + V[n_0] + E_{xc}[n_0], \quad (2.27)$$

onde $E_{xc}[n_0]$ (energia de troca e correlação) possui as diferenças $T_c[n_0] = T[n_0] - T_s[n_0]$ e $U_{xc}[n_0] = U[n_0] - U_H[n_0]$. As energias $U_H[n_0]$ e $V[n_0]$ são dadas por

**Estamos tratando do formalismo de DFT a temperatura zero.

^{††}Note que o operador $U[n_0]$ contém uma contribuição devido a troca, enquanto que o operador $T[n_0]$ não. Isto deve-se ao fato do operador $T[n_0]$ ser de um corpo e a interação de troca ser de dois corpos (por exemplo, troca de momento entre dois elétrons).

$$U_H[n_0] = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon_r} \int \int \frac{n_0(r)n_0(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dr dr', \quad (2.28)$$

$$V[n_0] = \int n_0(r)v(r)dr. \quad (2.29)$$

Outro teorema dado por Hohenberg-Kohn nos diz que a densidade do GS é aquela que minimiza o funcional $E[n_0]$. Fazendo a minimização na equação 2.27 temos

$$0 = \frac{\partial E[n_0]}{\partial n_0(r)} = \frac{\partial T_s[n_0]}{\partial n_0(r)} + \frac{\partial U_H[n_0]}{\partial n_0(r)} + \frac{\partial E_{xc}[n_0]}{\partial n_0(r)} + \frac{\partial V[n_0]}{\partial n_0(r)} = \frac{\partial T_s[n_0]}{\partial n_0(r)} + v_H(r) + \frac{\partial E_{xc}[n_0]}{\partial n_0(r)} + v(r), \quad (2.30)$$

onde

$$v_H(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \int \frac{n_0(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dr', \quad (2.31)$$

é o potencial de Hartree.

Em 1965 W. Kohn e L. J. Sham (38) fizeram esta minimização e mostraram que para um regime onde n_0 varia lentamente (LDA - *Local Density Approximation*) podemos escrever a energia de troca e correlação como

$$E_{xc}[n_0] = \int \epsilon_{xc}(n_0)n_0(r)dr, \quad (2.32)$$

onde ϵ_{xc} é a energia de troca e correlação por elétron. Substituindo a equação 2.32 na equação 2.30 ficamos com

$$\frac{\partial T_s[n_0]}{\partial n_0(r)} + v_H + v_{xc} + v = 0, \quad (2.33)$$

onde

$$v_{xc} = \frac{\partial(n_0\epsilon_{xc}(n_0))}{\partial n_0}, \quad (2.34)$$

é o potencial de troca e correlação na aproximação LDA. Se escolhermos um potencial

efetivo $v_s(r)$ de tal forma que

$$v_s(r) = v(r) + v_H(r) + v_{xc}(r), \quad (2.35)$$

podemos descrever um problema de muitos corpos interagente em termos de um problema de uma única partícula sujeita a um potencial $v_s(r)$. Escrevendo a equação de Schrödinger para $v_s(r)$ ficamos com

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v_s(r) \right] \phi_i(r) = \epsilon_i \phi_i(r). \quad (2.36)$$

Desta forma a densidade $n_s(r)$ devido a este potencial efetivo pode ser escrita como

$$n_s(r) = n_0(r) = \sum_i^N |\phi_i(r)|^2. \quad (2.37)$$

As equações 2.36 e 2.37 são as chamadas equações de Kohn-Sham e os ϕ_i e ϵ_i são os autovetores e autovalores de Kohn-Sham. Na próxima seção iremos mostrar como resolvemos este conjunto de equações.

2.2.2 Cálculo autoconsistente

As equações de Kohn-Sham 2.36 e 2.37 e a equação 2.35 constituem um sistema de equações acopladas. Para encontrar a densidade de elétrons $n_s(r)$ definida pela equação 2.37 precisamos dos autoestados de Kohn-Sham $\phi_i(r)$, para encontrar $\phi_i(r)$ precisamos resolver a equação 2.36 que depende do potencial efetivo $v_s(r)$ e para encontrar $v_s(r)$ definido pela equação 2.35 precisamos de $n_s(r)$ novamente. Esta situação é ilustrada pela figura 2.2.

Para resolver este sistema de equações acopladas usamos um método de aproximações sucessivas chamado cálculo autoconsistente. Neste método começamos o cálculo com um “chute” inicial para $v_s(r)$, em seguida resolvemos a equação 2.36 de forma a encontrar $\phi_i(r)$ e ϵ_i que são usados para calcular $n_s(r)$ na equação 2.37. Com essa densidade

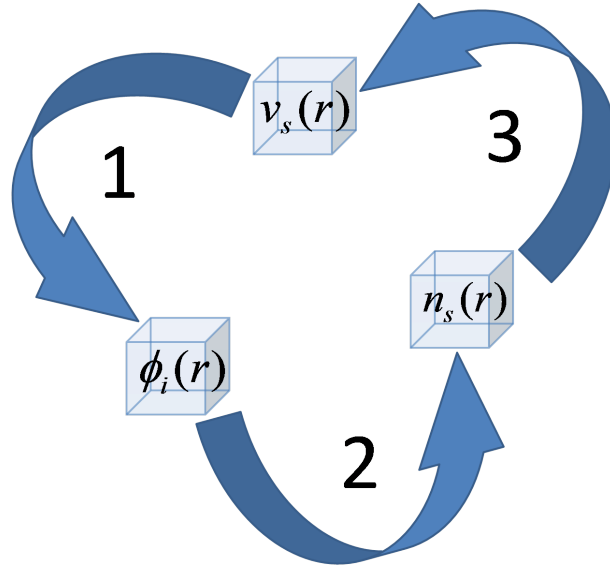


Figura 2.2 – Cálculo Autoconsistente: Uma variável na base de uma seta é necessária para determinar a variável na ponta da mesma seta. O potencial efetivo v_s e os autoestados de Kohn-Sham ϕ_i estão acoplados por 1 - equação 2.36 -, ϕ_i e a densidade de elétrons n_s estão acoplados por 2 - equação 2.37 - e finalmente n_s e v_s estão acoplados por 3 - equação 2.35.

$n_s(r)$ calculamos um novo potencial $v_s(r)$ e começamos o ciclo novamente até que o sistema atinja a convergência. Cada ciclo do cálculo é chamado de iteração e o critério de convergência usado em nossos cálculos foi

$$|\epsilon_0^{novo} - \epsilon_0^{velho}| < \epsilon', \quad (2.38)$$

ou seja, a diferença entre a energia do primeiro nível de uma iteração e a anterior deve ser menor que ϵ' . Em nossos cálculos $\epsilon' = 1 \times 10^{-8}$ meV.

Quando temos o cálculo autoconsistente implementado em um algoritmo, quanto menos iterações o cálculo necessitar para convergir mais economizamos em tempo de execução computacional. Em nossos cálculos, para cada valor de campo magnético B e potencial aplicado aos eletrodos V_g é necessário realizar o procedimento descrito acima (cálculo autoconsistente). Utilizamos como chute inicial para v_s , para um dado campo magnético, o valor do potencial v_s já calculado para um campo magnético anterior. Isto faz com que o cálculo convirja mais rapidamente.

Outra questão importante no cálculo autoconsistente é que muitas vezes quando se soma o novo potencial por inteiro entre uma iteração e outra, o cálculo pode oscilar muito

e nunca convergir. Para resolver este problema em cada iteração ao invés de somarmos o potencial v_s desta iteração por inteiro, usamos um potencial que é a mistura entre o potencial determinado nesta iteração e o potencial determinado na iteração anterior. Este potencial misturado v_s^{mix} é dado por

$$v_s^{mix} = \alpha v_s^{novo} + (1 - \alpha)v_s^{velho}, \quad (2.39)$$

onde α é o parâmetro de mistura e indica que porcentagem do novo potencial queremos somar em cada iteração ($0 \leq \alpha \leq 1$).

Em nossos cálculos começamos o ciclo autoconsistente com um parâmetro de mistura $\alpha = 0.05$. Se este valor não for pequeno o bastante para o cálculo convergir o diminuimos ainda mais. Assim, garantimos que o cálculo autoconsistente convirja, mas essa convergência se dá de forma mais lenta.

2.2.3 Modelo 2D da DFT para o fio quântico

Antes de começar a definir nosso potencial de Hartree e os funcionais de troca e correlação primeiro vamos analisar como os efeitos de muitos corpos, através da DFT, irão entrar em nosso modelo. Como já definimos na seção 2.1, apenas a parte dependente de y do nosso Hamiltoniano será tratada numericamente. Como as equação de Kohn-Sham devem ser resolvidas também numericamente através do cálculo autoconsistente, estas devem depender apenas da direção y . Isto quer dizer que a densidade deve depender apenas de y .

Em uma formulação tridimensional do problema do fio quântico a densidade tridimensional $n_{3D}(r)$ é dependente de y e z , ver seção 2.3. Ou seja, no modelo de DFT 3D para o fio, devemos tratar tanto a parte y como a parte z numericamente. Desta forma, escolhemos trabalhar com as equações de Kohn-Sham bidimensionais, pois são definidas em função da densidade bidimensional $n_{2D}(r)$ que depende apenas da direção y e assim permite que somente esta direção seja tratada numericamente.

2.2.4 Potencial de Hartree

Agora iremos partir para o cálculo do potencial de Hartree para nosso modelo da DFT 2D. No cálculo bidimensional do potencial de Hartree levamos em conta não só a interação de Coulomb entre os elétrons do fio, mas também a interação destes elétrons com os eletrodos que formam o mesmo. Usando o método das imagens para este problema obtemos que o potencial de Hartree é dado por

$$v_H(y) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \int_{-\infty}^{\infty} n(y_0) \ln \left[\frac{(y - y_0)^2}{(y - y_0)^2 + 4b^2} \right] dy_0. \quad (2.40)$$

onde b é a distância entre o plano do 2DEG e os eletrodos. Os detalhes deste cálculo estão no Apêndice C.

Em modelos 3D é mais usual trabalhar com a forma diferencial do potencial de Hartree, que pode ser obtida aplicando-se o laplaciano em sua forma integral, ou seja

$$v_H^{3D}(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \int \frac{n'_{3D}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r', \quad (2.41)$$

$$\nabla^2 v_H^{3D}(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \int n'_{3D}(\vec{r}') [-4\pi\delta(r - r')] d^3r',$$

$$\nabla^2 v_H^{3D}(\vec{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon} n'_{3D}(\vec{r}), \quad (2.42)$$

onde $n'_{3D}(\vec{r})$ é a densidade de partículas tridimensional. Trabalhar numericamente com a equação de Poisson 2.42 é bem mais eficiente que trabalhar com a integral na equação 2.41. Entretanto, no problema 2D não é possível obter uma forma diferencial para o potencial de Hartree, pois $\nabla^2 \frac{1}{|\vec{r}|}$ não é proporcional à função $\delta(r)$ para \vec{r} bidimensional. Desta forma teremos que lidar com a forma integral do potencial de Hartree 2D dada pela equação 2.40.

Existem pontos de divergência na função $\ln(y - y_0)$ quando $y = y_0$. Assim, para resolver esta integral usamos a função *gsl-integration-qags* disponível na biblioteca GSL

(GNU *Scientific Library*). Esta função usa o método de quadratura de Gauss-Kronrod para realizar integrais numéricas com pontos de singularidades^{‡‡}.

2.2.5 Potencial de troca e correlação

A energia de troca e correlação por elétron que foi introduzida na equação 2.32 pode ser separada em duas contribuições, uma devido à troca e outra devido à correlação, ou seja

$$\epsilon_{xc} = \epsilon_x + \epsilon_c. \quad (2.43)$$

A parte de troca da equação 2.43, na aproximação LDA 2D, é conhecida exatamente(40)[†]

$$\epsilon_x(r_s) = -\frac{4\sqrt{2}}{3\pi r_s}, \quad (2.44)$$

onde $r_s = 1/\sqrt{\pi n a_B^2}$, sendo n a densidade 2D e a_B o raio de Bohr efetivo. Como estamos interessados em investigar fenômenos dependentes de spin, utilizaremos a versão dependente de spin da LDA: *local spin density approximation* (LSDA). Nesta aproximação a energia de troca 2D é dada por:

$$\epsilon_x(r_s, \xi) = \epsilon_x(r_s) \frac{[(1 + \xi)^{3/2} + (1 - \xi)^{3/2}]}{2}, \quad (2.45)$$

$$\epsilon_x(r_s, \xi) = -\frac{2\sqrt{2}}{3\pi r_s} [(1 + \xi)^{3/2} + (1 - \xi)^{3/2}] \quad (2.46)$$

onde $\xi = (n \uparrow - n \downarrow)/n$ é a polarização fracional de spin.

Para a energia de correlação utilizamos a parametrização definida por Attaccalite (41),

$$\epsilon_c(r_s, \xi) = (e^{-\beta r_s} - 1) \epsilon_x^{(6)}(r_s, \xi) + \alpha_0(r_s) + \alpha_1(r_s)\xi^2 + \alpha_2(r_s)\xi^4 \quad (2.47)$$

^{‡‡}Mais detalhes das funções da GSL citadas aqui podem ser encontradas na referência (43)

[†]As equações desta seção estão escritas em unidades de Hartree

onde

$$\epsilon_x^{(6)}(r_s, \xi) = \epsilon_x(r_s, \xi) - \left(1 + \frac{3}{8}\xi^2 + \frac{3}{128}\xi^4\right) \epsilon_x(r_s, 0), \quad (2.48)$$

$$\alpha_i(r_s) = A_i + (B_i r_s + C_i r_s^2 + D_i r_s^3) \ln \left(1 + \frac{1}{E_i r_s + F_i r_s^{3/2} + G_i r_s^2 + H_i r_s^3}\right). \quad (2.49)$$

Os valores dos parâmetros usados nas equações acima estão na Tabela 2.1.

Tabela 2.1 – Valores dos parâmetros usados na parametrização da energia de correlação. Retirado das referências (41) e (42). Os parâmetros D_i 's são obtidos fazendo $D_i = -A_i H_i$ e o valor de β é igual a 1,3386.

	$i = 0$	$i = 1$	$i = 2$
A_i	-0,1925	0,117331	0,0234188
B_i	0,0863136	-3,394 x 10 ⁻²	-0,037093
C_i	0,0572384	-7,66765 x 10 ⁻³	0,0163618
E_i	1,0022	0,4133	1,424301
F_i	-0,02069	0	0
G_i	0,33997	6,68467 x 10 ⁻²	0
H_i	1,747 x 10 ⁻²	7,799 x 10 ⁻⁴	1,163099

Para obtermos o potencial de troca e correlação na aproximação LSDA fazemos:

$$v_{xc}^\sigma = \frac{\partial(n\epsilon_{xc})}{\partial n^\sigma} = \frac{\partial(n\epsilon_x)}{\partial n^\sigma} + \frac{\partial(n\epsilon_c)}{\partial n^\sigma} \quad (2.50)$$

onde ϵ_x e ϵ_c são dadas respectivamente pelas equações 2.46 e 2.47.

2.3 Cálculo da densidade de partículas

A densidade de partículas tridimensional em um sistema quântico é definida como:

$$n_{3D}(x, y, z) = \sum_{\sigma} \sum_j f_j^\sigma(\epsilon) |\psi_j^\sigma(x, y, z)|^2, \quad (2.51)$$

sendo que σ representa o número quântico de spin, j representa todo o conjunto de números quânticos orbitais e $f_j^\sigma(\epsilon)$ é a função de Fermi. Quando estivermos tratando o Hamiltoniano sem o termo zP_y e na aproximação de partícula independente, equação

2.10, os estados ψ_j^σ serão dados pela equação 2.13. Se estivermos levando em conta efeitos de muitos corpos, estes estados serão dados pelos auto-estados de Kohn-Sham ϕ_j^σ . Finalmente, se estivermos levando em conta o Hamiltoniano com o termo zP_y e na aproximação de partícula independente, equação 2.8, estes estados serão dados pela equação 2.14*.

Estamos interessados em encontrar a densidade de partículas bidimensional, pois é ela que usamos nos cálculos levando em conta a interação de muitos corpos, ver seção 2.2. A densidade de partículas bidimensional pode ser obtida a partir da densidade tridimensional pela seguinte equação

$$n_{2D}(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} n_{3D}(x, y, z) dz. \quad (2.52)$$

No caso em que os ψ_j^σ são dados pela equação 2.13 ou pelos autoestados de Kohn-Sham ϕ_j^σ , o cálculo da densidade 2D é mais simples. Definindo ψ_j^σ como sendo

$$\psi_{k_x, n_y, n_z}^\sigma = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x}} \chi_{n_y}^\sigma(y) \zeta_{n_z}(z)$$

e substituindo na equação 2.51 ficamos com

$$n_{3D} = \sum_{\sigma} \sum_{k_x, n_y, n_z} f_{k_x, n_y, n_z}^\sigma(\epsilon) \frac{|\chi_{n_y}^\sigma|^2}{L_x} |\zeta_{n_z}|^2. \quad (2.53)$$

Substituindo a equação 2.53 na equação 2.52 temos

$$n_{2D} = \frac{1}{L_x} \sum_{\sigma} \sum_{k_x, n_y, n_z} f_{k_x, n_y, n_z}^\sigma(\epsilon) |\chi_{n_y}^\sigma|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |\zeta_{n_z}|^2 dz}_{=1}, \quad (2.54)$$

*No caso onde temos o termo zP_y e efeitos de muitos corpos, os estados $\Psi_{k_x, n_y, n_z}^0(\vec{r})$ da equação 2.14 serão os auto estados de Kohn-Sham ϕ_j^σ .

$$n_{2D} = \frac{1}{L_x} \sum_{\sigma} \sum_{k_x, n_y, n_z} f_{k_x, n_y, n_z}^{\sigma}(\epsilon) |\chi_{n_y}^{\sigma}|^2. \quad (2.55)$$

Dividindo e multiplicando o lado direito da equação 2.55 por Δk_x e usando que $\Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x}$ ficamos com

$$n_{2D} = \frac{1}{2\pi} \sum_{\sigma} \sum_{k_x, n_y, n_z} f_{k_x, n_y, n_z}^{\sigma}(\epsilon) |\chi_{n_y}^{\sigma}|^2 \Delta k_x. \quad (2.56)$$

No limite em que $L_x \rightarrow \infty$ consequentemente $\Delta k_x \rightarrow 0$. Neste limite o somatório em k_x pode ser transformado em uma integral e desta forma

$$n_{2D} = \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \sum_{n_y, n_z} |\chi_{n_y}^{\sigma}|^2 \int_0^{\infty} f_{k_x, n_y, n_z}^{\sigma}(\epsilon) dk_x.$$

Transformando a integral de dk_x para $d\epsilon$ ficamos com

$$n_{2D} = \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \sum_{n_y, n_z} |\chi_{n_y}^{\sigma}|^2 \int_{\epsilon_{n_y, n_z}^{\sigma}}^{\infty} g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon, \quad (2.57)$$

onde $g(\epsilon) = \frac{1}{2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^2 \left(\epsilon - \epsilon_{n_y, n_z}^{\sigma} \right)^{-1/2}$ é a densidade de estados 1D.

Quando estamos levando em conta o termo zPy os auto-estados são expandidos em função dos auto-estados do problema sem o termo zPy , como mostrado pela equação 2.14.

Assim temos

$$\psi_{k_x, p, q}^{\sigma} = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L_x}} \sum_{n_y, n_z} C_{\sigma, n_y, n_z}^{p, q} \chi_{n_y}^{\sigma}(y) \zeta_{n_z}(z),$$

que substituída na equação 2.51 nos fornece

$$n_{3D} = \frac{1}{L_x} \sum_{\sigma} \sum_{k_x, p, q} f_{k_x, p, q}^{\sigma}(\epsilon) \left| \sum_{n_y, n_z} C_{\sigma, n_y, n_z}^{p, q} \chi_{n_y}^{\sigma} \zeta_{n_z} \right|^2. \quad (2.58)$$

Fazendo o mesmo procedimento que antes, multiplicando e dividindo o lado direito da equação 2.58 por Δk_x , transformando a soma em k_x em uma integral e passando esta integral de dk_x para $d\epsilon$ ficamos com

$$n_{3D} = \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \sum_{p, q} \int_{\epsilon_{p, q}^{\sigma}}^{\infty} g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \left| \sum_{n_y, n_z} C_{\sigma, n_y, n_z}^{p, q} \chi_{n_y}^{\sigma} \zeta_{n_z} \right|^2.$$

Substituindo esta equação na equação 2.52 temos

$$n_{2D} = \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \sum_{p, q} \int_{\epsilon_{p, q}^{\sigma}}^{\infty} g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} \left| \sum_{n_y, n_z} C_{\sigma, n_y, n_z}^{p, q} \chi_{n_y}^{\sigma} \zeta_{n_z} \right|^2 dz.$$

Usando a ortogonalidade das funções de onda $\zeta_{n_z}(z)$, obtemos

$$n_{2D} = \frac{1}{\pi} \sum_{\sigma} \sum_{p, q} \int_{\epsilon_{p, q}^{\sigma}}^{\infty} g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \left(\sum_{n_z} \left| \sum_{n_y} C_{\sigma, n_y, n_z}^{p, q} \chi_{n_y}^{\sigma} \right|^2 \right). \quad (2.59)$$

Na implementação do cálculo da densidade 2D a temperatura finita usamos as equações 2.57 e 2.59. Para temperatura zero $f(\epsilon) = \theta(\epsilon - \epsilon_f)$, onde ϵ_f é a energia de Fermi do fio quântico e $\theta(x)$ é a função degrau de x .

2.3.1 Relação densidade/potencial químico

No tipo de sistemas que consideramos podemos trabalhar em dois regimes diferentes: (i) regime de densidade de cargas constante ou (ii) regime de potencial químico (energia de Fermi) constante. Diferentes detalhes da implementação dependem de qual dos dois regimes escolhermos para trabalhar. Do ponto de vista experimental, os dois regimes são

possíveis de se reproduzir em laboratório (36), (45)-(47).

Regime de energia de Fermi constante: Para reproduzir em laboratório um sistema neste regime, o fio quântico é conectado a um reservatório de elétrons que fixa o nível de Fermi em todo o fio. Desta forma, o nível de Fermi do fio será o nível de Fermi do reservatório. No cálculo computacional entramos com o valor do nível de Fermi e diretamente, através das equações 2.57 ou 2.59, calculamos as densidades de partículas total e parcial devido aos elétrons com spin up e spin down.

Regime de densidade de cargas constante: Neste regime o fio quântico não é conectado ao reservatório de elétrons e, desta forma, a densidade de elétrons no fio é igual a densidade de íons presentes na camada de doadores. No cálculo computacional devemos entrar com o valor da densidade de partículas total, a partir dela calcular o nível de Fermi do fio e, em seguida, calcular as densidades de elétrons com spin up e spin down. Não temos, no entanto, uma expressão analítica para o nível de Fermi em função da densidade de partículas $\mu(n_{2D})$, pois não é possível inverter as equações 2.57 e 2.59 de forma a obter $\mu(n_{2D})$. Desta forma, usamos o método da bisseção para calcular μ numericamente a partir de n_{2D} .

2.4 Cálculo numérico da equação de Schrödinger

Nesta seção mostramos como a parte y do nosso modelo foi tratada numericamente. Usamos o método de diferenças finitas para a discretização da equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo

$$\frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2} [v(y) - \epsilon] \varphi(y) = 0 \quad (2.60)$$

Desta forma, nosso objetivo se resume a encontrar uma forma discreta para uma equação diferencial de segunda ordem. Expandindo as funções $\varphi(y + dy)$ e $\varphi(y - dy)$ até segunda ordem em série de Taylor temos

$$\varphi(y + dy) = \varphi(y) + \frac{d\varphi(y)}{dy}dy + \frac{1}{2!} \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2}dy^2, \quad (2.61)$$

$$\varphi(y - dy) = \varphi(y) - \frac{d\varphi(y)}{dy}dy + \frac{1}{2!} \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2}dy^2. \quad (2.62)$$

Somando as equações 2.61 e 2.62 e isolando o termo de segunda derivada ficamos com

$$\frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} = \frac{\varphi(y - dy) - 2\varphi(y) + \varphi(y + dy)}{dy^2}. \quad (2.63)$$

Substituindo a equação 2.63 na equação 2.60 obtemos

$$-\varphi(y - dy) + \left(2 + \frac{2m^*}{\hbar^2}dy^2v(y)\right)\varphi(y) - \varphi(y + dy) = \frac{2m^*}{\hbar^2}dy^2\epsilon\varphi(y). \quad (2.64)$$

Agora suponhamos que o sistema tenha um comprimento L_y na direção y , de forma que $-L_y/2 < y < L_y/2$. Para um dado $v(y)$ definido neste intervalo, podemos discretizá-lo da forma representada pela figura 2.3. A escolha da condição de contorno para $v(y)$ é tal que: $\varphi(-L_y/2) = \varphi(L_y/2) = 0$.

Usando o potencial discretizado v_i e definindo $\varphi(y) \rightarrow \varphi_i$, $\varphi(y + dy) \rightarrow \varphi_{i+1}$, $\varphi(y - dy) \rightarrow \varphi_{i-1}$ e $dy \rightarrow \Delta y$ podemos escrever a equação 2.64 em sua forma discreta

$$-\varphi_{i-1} + \beta_i\varphi_i - \varphi_{i+1} = \lambda\varphi_i, \quad (2.65)$$

onde $\beta_i \equiv 2 + \frac{2m^*}{\hbar^2}\Delta y^2v_i$ e $\lambda \equiv \frac{2m^*}{\hbar^2}\Delta y^2\epsilon$. Como vemos na equação 2.65 temos uma equação relacionando φ_i com os seus vizinhos próximos φ_{i+1} e φ_{i-1} . Sendo assim, podemos escrever a equação 2.65 para $1 < i < n$. Fazendo isto ficamos com a equação matricial

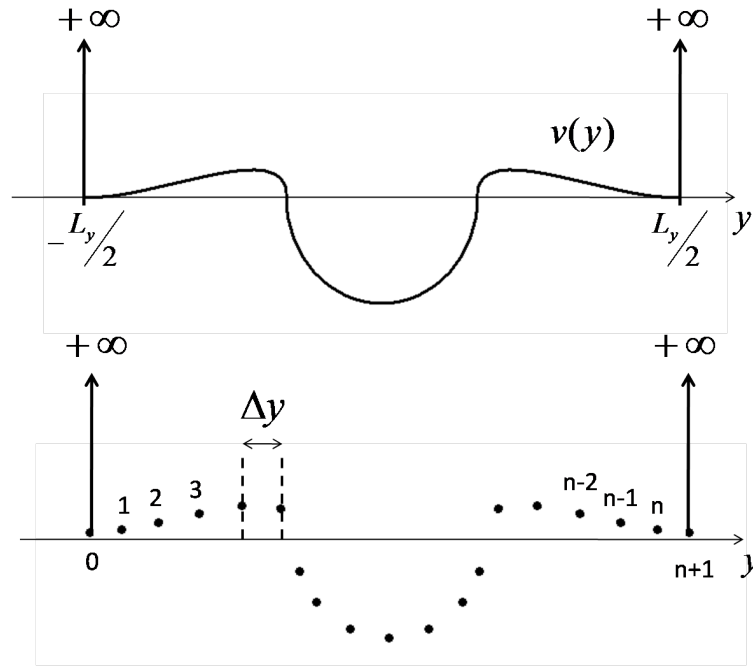


Figura 2.3 – Discretização uniforme de um potencial $v(y)$ definido no intervalo $-L_y/2 < y < L_y/2$. Nos extremos, $v(-L_y/2) = v(L_y/2) = +\infty$ garantindo, assim, a condição de contorno $\varphi(-L_y/2) = \varphi(L_y/2) = 0$. A distância entre um ponto i e $i + 1$ é Δy .

$$\begin{bmatrix} \beta_1 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & \beta_2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & \beta_3 & -1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \beta_4 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & \beta_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{bmatrix} \tag{2.66}$$

A solução da equação matricial acima nos fornecerá n autovalores e n autovetores. Para resolvê-la usamos a função *dstevx* presente na biblioteca do Lapack (*Linear Algebra Package*). Esta função calcula os autovalores e autovetores de quaisquer matrizes tridimensionais simétricas reais.

Nesta seção e nas anteriores apresentamos toda a base teórica para o cálculo da estrutura eletrônica no fio quântico. Na próxima seção apresentaremos o cálculo da condutância através do fio no regime de resposta linear.

2.5 Condutância: Fórmula de Landauer-Büttiker

Consideremos que o fio esteja conectado em suas extremidades a dois contatos e tenha um potencial V_{SD} aplicado entre eles, como representado na figura 2.4. Os potenciais químicos nos contatos esquerdo (E) e direito (D) são representados respectivamente por μ_E e μ_D , sendo que $\mu_E - \mu_D = eV_{SD}$. Desta forma, a corrente na direção x pode ser caculada da seguinte forma

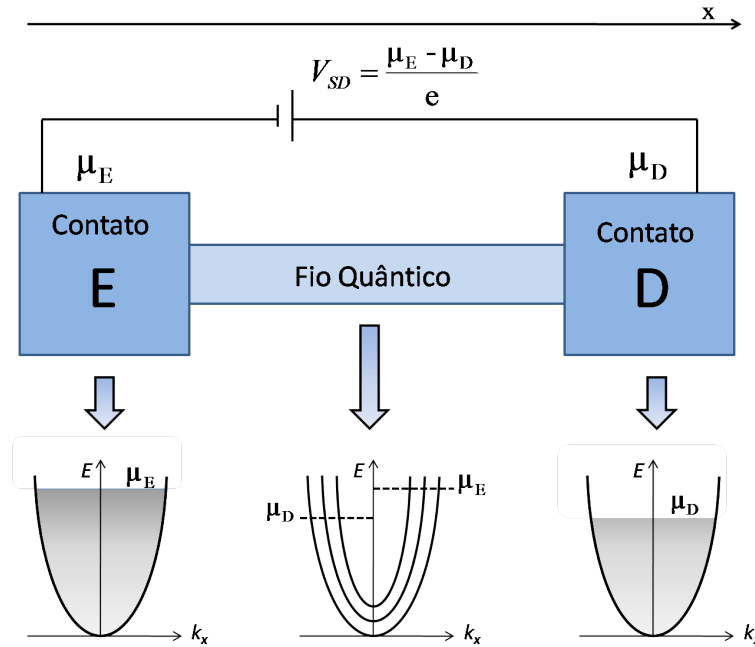


Figura 2.4 – Fio quântico conectado a dois contatos. Como os contatos têm uma dimensão infinita com relação ao fio quântico, temos um número de modos transversais contínuo nos contatos e discreto no fio quântico. No fio quântico, os modos transversais têm potencial químico μ_E para os estados $+k_x$, e μ_D para os estados $-k_x$.

$$I = I_E + I_D, \quad (2.67)$$

onde I_{ED} é a corrente que flui de E para D e I_{DE} é a corrente que flui de D para E. Sendo assim, definimos I_E e I_D como sendo (44)

$$I_{ED} = \frac{e}{L_x} \sum_j \sum_{k_x=0}^{\infty} v_{j,k_x} T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_E}, \quad (2.68)$$

$$I_{DE} = \frac{e}{L_x} \sum_j \sum_{k_x=-\infty}^0 v_{j,k_x} T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_D}, \quad (2.69)$$

onde L_x é o comprimento do fio, k_x é o vetor de onda na direção x , j representa o conjunto restante de números quânticos (orbital e de spin), v_{j,k_x} é a velocidade de um elétron no estado $\{j, k_x\}$, T_{k_x} é a probabilidade deste elétron ser transmitido entre os contatos e os termos $f_{j,k_x}^{\mu_E}$ e $f_{j,k_x}^{\mu_D}$ são as funções de Fermi no contato E e D respectivamente. A diferença nos valores atribuídos a k_x nos somatórios das equações 2.68 e 2.69 deve-se ao fato de que a corrente no sentido do eixo- x é transportada apenas pelos valores positivos de k_x ($v_{j,k_x} > 0$) e a corrente no sentido oposto do eixo- x é transportada apenas pelos valores negativos de k_x ($v_{j,k_x} < 0$). Substituindo as equações 2.68 e 2.69 na equação 2.67 temos

$$\begin{aligned} I &= \frac{e}{L_x} \sum_j \left(\sum_{k_x=0}^{\infty} v_{j,k_x} T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_E} + \sum_{k_x=-\infty}^0 v_{j,k_x} T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_D} \right), \\ I &= \frac{e}{L_x} \sum_j \left(\sum_{k_x=0}^{\infty} \frac{\hbar k_x}{m^*} T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_E} + \sum_{k_x=-\infty}^0 \frac{\hbar k_x}{m^*} T_{k_x} f_{j,k_x}^{\mu_D} \right), \\ I &= \frac{e\hbar}{L_x m^*} \sum_j \sum_{k_x=0}^{\infty} k_x T_{k_x} (f_{j,k_x}^{\mu_E} - f_{j,k_x}^{\mu_D}), \end{aligned} \quad (2.70)$$

onde usamos que $v_{j,k_x} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_{j,k_x}}{\partial k_x}$ e que $\epsilon_{j,k_x} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \epsilon_j$. Transformando a soma em k_x em uma integral ficamos com

$$\begin{aligned} I &= \frac{e\hbar}{2\pi m^*} \sum_j \int_0^{\infty} k_x T_{k_x} (f_{j,k_x}^{\mu_E} - f_{j,k_x}^{\mu_D}) dk_x, \\ I &= \frac{e}{h} \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} T_j(\epsilon) [f^{\mu_E}(\epsilon) - f^{\mu_D}(\epsilon)] d\epsilon. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Multiplicando e dividindo o lado direito da equação 2.71 por eV_{SD}

$$I = \frac{e^2 V_{SD}}{h} \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} T_j(\epsilon) \frac{[f^{\mu_E}(\epsilon) - f^{\mu_D}(\epsilon)]}{e V_{SD}} d\epsilon. \quad (2.72)$$

No regime de resposta linear temos que $\mu_E - \mu_D = e V_{SD} \approx 0$. Neste limite a equação 2.72 pode ser escrita como

$$I = \frac{e^2 V_{SD}}{h} \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} T_j(\epsilon) \left(-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon. \quad (2.73)$$

Neste ponto, podemos tirar da equação 2.73 uma equação no limite de temperatura zero e outra no limite de um coeficiente de transmissão $T_j(\epsilon) = \theta(\epsilon - \epsilon_j)$. Neste último caso temos

$$I = \frac{e^2 V_{SD}}{h} \sum_j \int_{\epsilon_j}^{\infty} \left(-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon, \quad (2.74)$$

$$I = \frac{e^2 V_{SD}}{h} \sum_j f(\epsilon_j). \quad (2.75)$$

Desta forma, a condutância é dada por

$$G = \frac{\partial I}{\partial V_{SD}} = \frac{e^2}{h} \sum_j f(\epsilon_j). \quad (2.76)$$

Esta equação descreve a condutância de um fio quântico no limite em que $T_j(\epsilon) = \theta(\epsilon - \epsilon_j)$.

No limite de temperatura zero ($f(\epsilon) = \theta(\epsilon_f - \epsilon)$), segue da equação 2.73 que

$$I = \frac{e^2 V_{SD}}{h} \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} T_j(\epsilon) \delta(\epsilon - \epsilon_f) d\epsilon, \quad (2.77)$$

$$I = \frac{e^2 V_{SD}}{h} \sum_j T_j(\epsilon_f). \quad (2.78)$$

Neste caso a condutância é dada por

$$G = \frac{\partial I}{\partial V_{SD}} = \frac{e^2}{h} \sum_j T_j(\epsilon_f). \quad (2.79)$$

Esta é a equação para a condutância de um fio quântico a temperatura zero. Se substituirmos o coeficiente de transmissão $T_j(\epsilon) = \theta(\epsilon - \epsilon_j)$ na equação 2.79 ou a função de Fermi para temperatura zero na equação 2.76 ficamos com

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_j \theta(\epsilon_f - \epsilon_j). \quad (2.80)$$

que é a equação da condutância à temperatura zero no limite em que $T_j(\epsilon) = \theta(\epsilon - \epsilon_j)$.

Com isto, fechamos este capítulo onde apresentamos a base teórica para o cálculo da estrutura eletrônica e da condutância em um fio quântico infinito com um campo magnético aplicado em sua direção.

Capítulo 3

Resultados e Discussões

Neste capítulo apresentamos os resultados para o nosso modelo na aproximação de partícula independente, Hartree e DFT. Veremos que o termo zP_y , equação 2.9, é importante para se obter uma melhor descrição quantitativa de experimentos. É importante salientar que cálculos da condutância levando em conta o termo zP_y e efeitos de muitos corpos nunca foram apresentados na literatura.

Em todos os nossos gráficos usamos o conjunto de parâmetros que está na tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Valores dos parâmetros usados para fazer os gráficos desta dissertação. Temos dois valores para g : $g = -2.0$ é usado nos gráficos obtidos sem o termo zP_y e $g = -0.44$ para gráficos levando em conta o termo zP_y .

parâmetro	símbolo	valor
fator giromagnético	g	-2.0 / -0.44
constante de permeabilidade do <i>GaAs</i>	ε_r	12.9
massa efetiva do elétron no <i>GaAs</i>	m_{ef}	0.067
energia de separação entre duas bandas em z	$\hbar\omega_z$	10 meV
energia de Fermi	ϵ_f	0 meV
temperatura	T	0 K

3.1 Resultados sem o termo zP_y

3.1.1 Aproximação de partícula independente

No gráfico experimental em escala de cinza da transcondutância, figura 1.8.b, podemos ver que a campo magnético $B = 0$ T e em uma faixa de potencial aplicado aos eletrodos V_g entre -1.05 e -0.85 V (ou seja, uma variação de $\Delta V_g = -0.85 - (-1.05) = 0.20$ V) temos três regiões brancas separadas por linhas cinza. Nas regiões de cor branca a transcondutância é nula, pois são regiões representadas por platôs no gráfico da condutância. Nas regiões de cor cinza a transcondutância é positiva, pois são as regiões que representam as transições entre platôs da condutância. Em termos de níveis de energia se percorrermos o eixo de V_g no sentido da esquerda para a direita no gráfico da transcondutância, cada linha cinza separando duas regiões brancas representa o ponto em que uma subbanda começa a ser ocupada. Desta forma, a campo $B = 0$ T na faixa $-1.05 < V_g < -0.85$ V temos três subbandas sendo ocupadas.

A figura 3.1 mostra um mapa equivalente àquele da figura 1.8.b obtido a partir da relação de dispersão do fio quântico, equação 2.12. Neste caso V_g altera apenas o grau de confinamento do fio, equação 2.6, mudando assim o número de modos transversais ocupados. Nesta figura o número de subbandas preenchidas varia de 0 a 19 em uma faixa de variação de V_g de -3.72 a -3.3 V (ou seja, $\Delta V_g = -3.3 - (-3.72) = 0.42$ V). Nesta figura usamos um valor de fator giromagnético $g = -2.0$ para simular os efeitos de troca e correlação, mas ainda assim o valor de campo magnético onde as linhas se cruzam pela primeira vez na figura 3.1 está entre $20 < B < 30$ T que é muito alto comparado com a região $6 < B < 10$ T onde eles ocorrem na figura 1.8.b.

Note que, nos pontos onde as linhas se cruzam na figura 3.1 não temos estruturas como os análogos 0.7, representados pelos pontos α_1 , α_2 e β_1 na figura 1.8.b e nem a anomalia 0.7, representada pelo ponto α_0 na mesma figura. Isto é esperado já que não estamos levando em conta efeitos de muitos corpos neste gráfico.

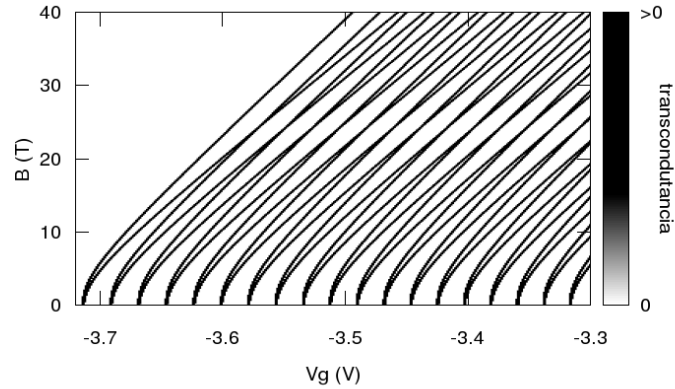


Figura 3.1 – Gráfico em escala de cores da transcondutância como função do potencial V_g aplicado aos eletrodos e do campo magnético B na aproximação de partícula independente sem o termo zP_y . Este gráfico foi obtido a partir da relação de dispersão dada pela equação 2.12. Em uma variação -3.72 a -3.3 V de tensão aplicada nos gates temos a população de 19 subbandas. Não temos presente a anomalia 0.7 e nos pontos de cruzamentos também não vemos nenhum comportamento que caracterize os análogos 0.7.

Na figura 3.2 temos as energias das seis primeiras subbandas up e down, equação 2.12, como função do potencial V_g para alguns valores de campos magnéticos. Para campo magnético $B = 0$ T, figura 3.2.a, estas subbandas estão degeneradas em spin e cada vez que uma delas começa a ser populada temos um pico na transcondutância, equação 2.80, que é representado pela escala de cinza no gráfico da figura 3.1. Podemos ver que esta degenerescência é quebrada no gráfico da figura 3.2.b que é feito para campo magnético $B = 10$ T. Agora os níveis de spin up e spin down cruzam o nível de Fermi em valores diferentes de V_g , ou seja, no gráfico da transcondutância teremos dois picos devido a mesma subbanda, um para spin up e outro para spin down. Na figura 3.1 vemos então o desdobramento de cada ponto positivo a campo magnético $B = 0$ em duas linhas para campo $B > 0$.

Na figura 3.2.c que é feita para campo $B = 25$ T temos as subbandas $|n_y \uparrow\rangle$ degeneradas com as $|(n_y - 1) \downarrow\rangle$. Este valor de campo magnético é justamente onde ocorre os primeiros cruzamentos na figura 3.1. Na figura 3.2.d temos as subbandas variando em função de V_g para um valor de campo magnético depois dos cruzamentos das subbandas de forma que, olhando para as figuras 3.2.a, b, c e d, vemos a evolução destas subbandas com relação ao

campo magnético. Note que as subbandas variam linearmente com relação ao potencial V_g nos gráficos da figura 3.2, podemos ver esta dependência expandindo até segunda ordem da série de Taylor a equação 2.6 em torno de $y = 0$. Os coeficientes de ordem zero e de segunda ordem desta expansão são proporcionais a V_g , ou seja $\Phi_{sg}(y) \propto V_g + V_g y^2 \equiv V_g + \frac{1}{2} m^* \omega_y^2 y^2$, onde definimos $\omega_y = \sqrt{2V_g/m^*}$. Desta forma, os níveis de energia para este potencial são proporcionais a V_g e a $\sqrt{V_g}$. Por isso, em uma variação pequena de V_g a energia varia aproximadamente linearmente em relação ao mesmo.

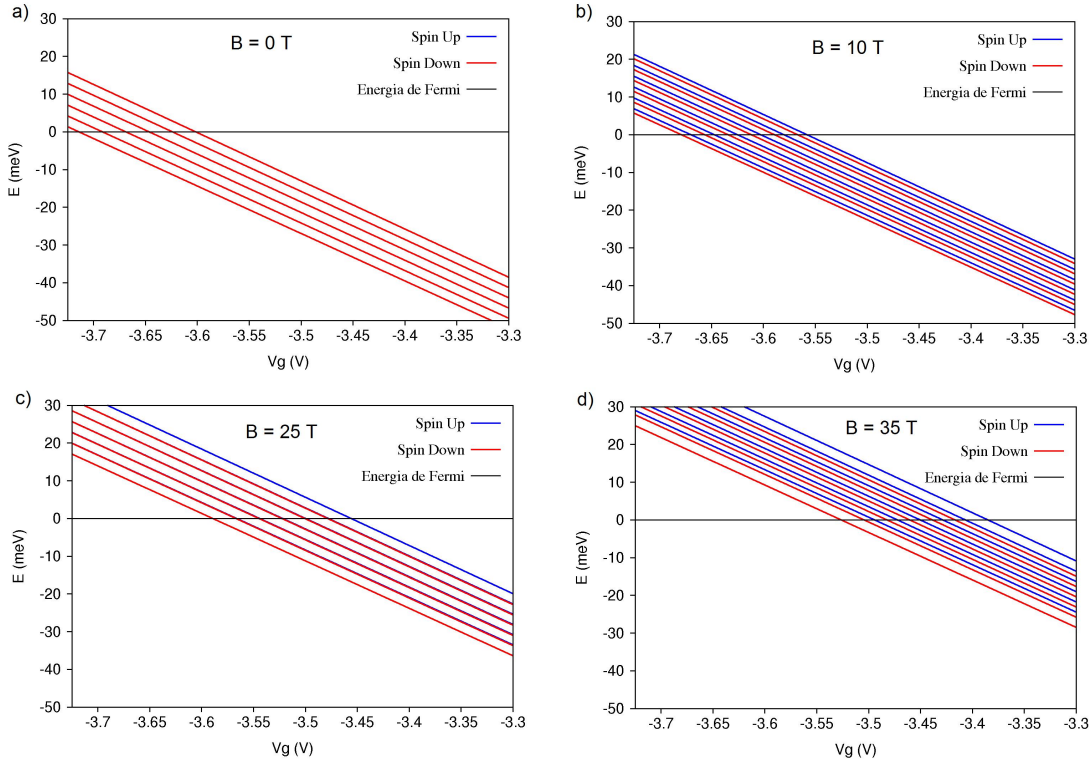


Figura 3.2 – Variação das seis primeiras subbandas $\epsilon_{k_x=0, n_y, n_z}^0$ como função do potencial V_g aplicado aos eletrodos na aproximação de partícula independente sem o termo zP_y , equação 2.12, para: (a) $B = 0$ T, (b) $B = 10$ T, (c) $B = 25$ T e (d) $B = 35$ T. Note a variação constante dos níveis com relação a variação do potencial V_g . Este comportamento se mantém independentemente do número de subbandas ocupadas.

Podemos ver na figura 3.2 que nada em especial ocorre quando um nível de energia cruza o nível de Fermi, tanto para valores de campo distantes dos cruzamentos quanto para valores de campo próximos dos cruzamentos da figura 3.1.

3.1.2 Aproximação de Hartree

Na figura 3.3 temos o gráfico em escala de cores da transcondutância como função do potencial V_g e o campo magnético B na aproximação de Hartree. Para obtê-lo consideramos $v_{xc} = 0$ na equação 2.35 de forma a levar em conta apenas a parte de Hartree da interação de Coulomb. Fazendo o procedimento autoconsistente, seção 2.2.2, calculamos os autovalores na aproximação de Hartree, os quais utilizamos no cálculo da condutância através da equação 2.80.

Podemos ver na figura 3.3 que o mapa da transcondutância se assemelha mais ao experimento, figura 1.8.b. A faixa entre os valores de V_g onde começamos a popular duas subbandas consecutivas é maior em relação ao gráfico da transcondutância na aproximação de partícula independente, figura 3.1. Para campo magnético $B = 0$ T temos quatro subbandas ocupadas entre $-3.72 < V_g < -3.3$ V. No que se diz respeito a anomalia e análogos 0.7 este gráfico na aproximação de Hartree não apresenta estas estruturas. Ou seja, nenhuma descontinuidade ocorre nos cruzamentos de níveis de energia.

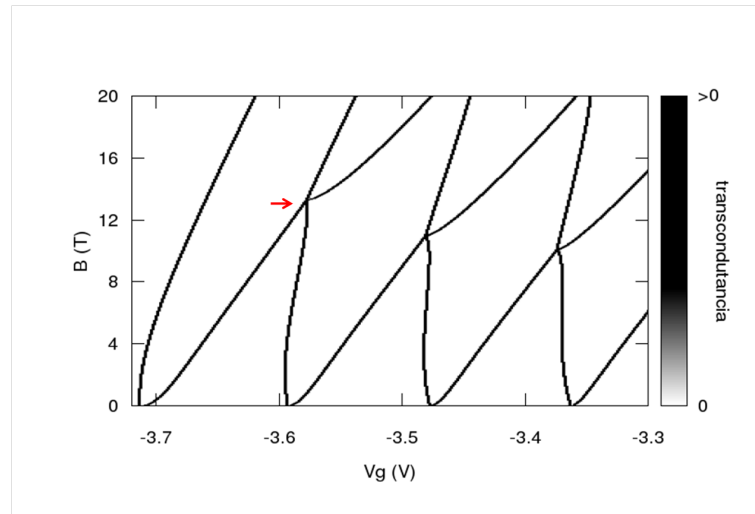


Figura 3.3 – Gráfico em escala de cinza da transcondutância na aproximação de Hartree em função do campo magnético B e do potencial V_g aplicado aos eletrodos sem o termo zP_y . Em uma variação -3.72 a -3.3 V de tensão aplicada nos gates temos a população de 4 subbandas, mais próximo do experimento. Não temos presente a anomalia 0.7 e nos pontos de cruzamentos também não vemos nenhum comportamento que caracterize os análogos 0.7.

Observando os gráficos da figura 3.4, nos quais temos os níveis de energia variando

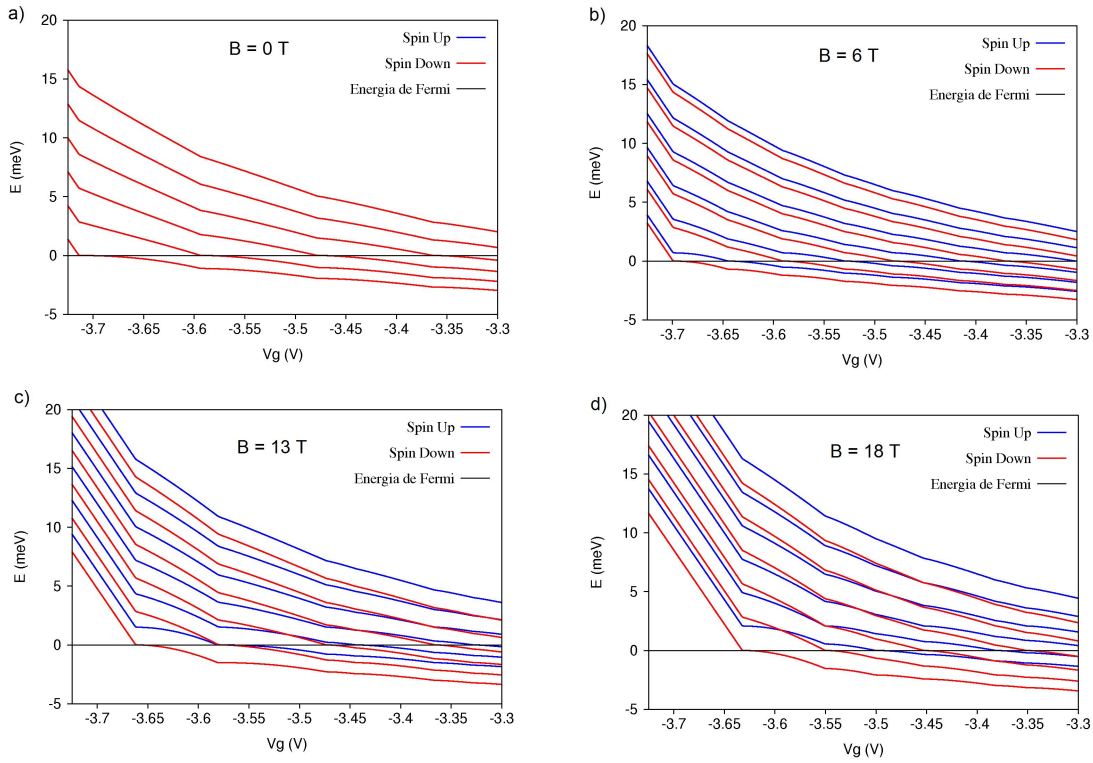


Figura 3.4 – Variação dos níveis de energia com relação ao potencial V_g aplicado aos eletrodos na aproximação de Hartree sem o termo zP_y . Cada vez que uma subbanda começa a ser populada os níveis sofrem uma mudança na variação com relação a V_g . Mas não temos nenhum comportamento diferente como desdobramento de spin devido a transição abruptas dos níveis quando estes se cruzam próximo ao nível de Fermi.

com V_g para alguns valores de campo magnético, podemos ver que o potencial de Hartree muda a inclinação dos níveis de energia cada vez que ocupamos mais subbandas. Este comportamento é diferente daquele dos gráficos da figura 3.2, onde a distância entre os níveis segue inalterada para qualquer número de subbandas preenchidas. Isto acontece pois toda vez que temos uma subbanda sendo ocupada a densidade de elétrons 2D aumenta (ver equação 2.57) e assim o potencial de Hartree também aumenta, pois é diretamente proporcional a densidade de elétrons 2D (ver equação 2.40). Como podemos ver nos gráficos da figura 3.4 sempre que uma subbanda é ocupada a diferença de energia entre subbandas de mesmo spin diminui. Isto ocorre pois o valor do potencial de Hartree é positivo e “achata” o fundo do poço formado pelo potencial eletrostático dos eletrodos.

Na aproximação de Hartree, a diferença de energia entre subbandas de spins opostos é apenas dada pela energia Zeeman, desta forma esta diferença segue inalterada em relação a variação de V_g em cada gráfico da figura 3.4. Por exemplo, podemos ver que a campo

magnético $B = 0$, figura 3.4.a, as subbandas de spins opostos são degeneradas para qualquer valor de V_g . Esta degenerescência é quebrada quando aplicamos um campo magnético $B > 0$. Isto pode ser visto na figura 3.4.b que é feita para campo magnético $B = 6$ T.

O gráfico da figura 3.4.c é feito para o valor de campo magnético onde ocorre o cruzamento indicado pela seta vermelha no gráfico da transcondutância, figura 3.3. Podemos ver na figura 3.4.c que a primeira subbanda down e a segunda up estão degeneradas apenas no ponto onde cruzam o nível de Fermi $\epsilon_f = 0$ meV. No entanto, para valores de V_g menores e maiores deste ponto elas não são degeneradas. O gráfico da figura 3.4.d é feito para um campo magnético maior que o campo onde ocorre o cruzamento indicado pela seta vermelha no gráfico da figura 3.3. Desta forma quando olhamos para as figuras 3.4.a, b, c e d vemos a evolução das subbandas em relação ao campo magnético.

3.1.3 Troca e correlação

Na figura 3.5 temos o gráfico em escala de cores da transcondutância como função de B e V_g levando em conta efeitos de troca e correlação no cálculo da estrutura eletrônica do fio. Para a obtenção deste gráfico fazemos os mesmos passos que foram feitos para o gráfico na aproximação de Hartree. No entanto, aqui levamos em conta o termo v_{xc} na equação 2.35. Depois de feito o cálculo autoconsistente, obtemos os autovalores de Kohn-Sham que usamos para o cálculo da condutância na equação 2.80.

No trabalho de Berggren et al. (26) temos gráficos da transcondutância feitos na aproximação de Hartree e também levando em conta efeitos de troca e correlação. Estes gráficos estão representados, respectivamente, nas figuras 3.6.a e b.

Podemos ver que os dois gráficos da transcondutância na aproximação de Hartree, figura 3.6.a e figura 3.3, são idênticos. A surpresa vem quando comparamos os gráficos que levam em conta a contribuição de troca e correlação, figura 3.6.b e figura 3.5. Nos pontos de cruzamento, regiões onde acontecem os análogos 0.7 - regiões marcadas por α_1 , α_2 e β_1 na figura 3.5 - temos diferenças entre nosso resultado e de Berggren et al. De uma forma

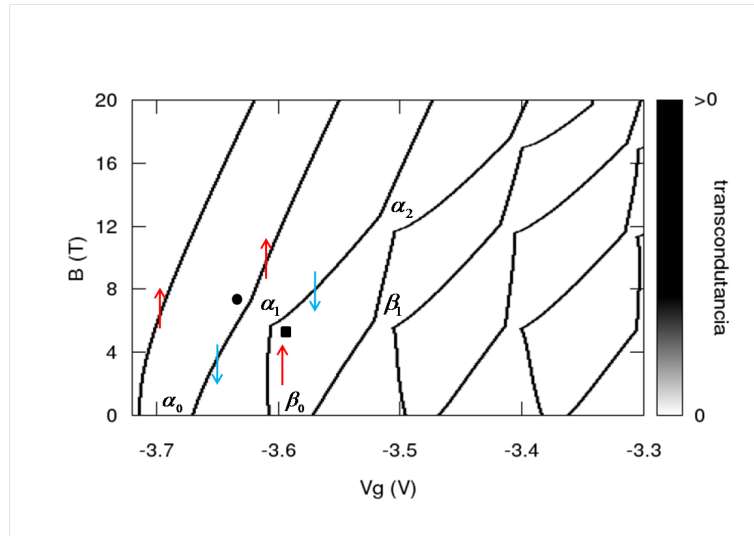


Figura 3.5 – Gráfico em escala de cores da transcondutância como função de V_g e B levando em conta efeitos de troca e correlação via DFT sem o termo zP_y . Podemos ver que a separação das linhas de spin up e down ocorrida no ponto demarcado por α_0 (anomalia 0.7) é muito grande. E nos pontos de cruzamento de spins opostos α_1 , α_2 e β_1 temos descontinuidades tanto das linhas de spin up quanto spin down. Estas descontinuidades são manifestações de transições de fase ferromagnéticas no fio quântico.

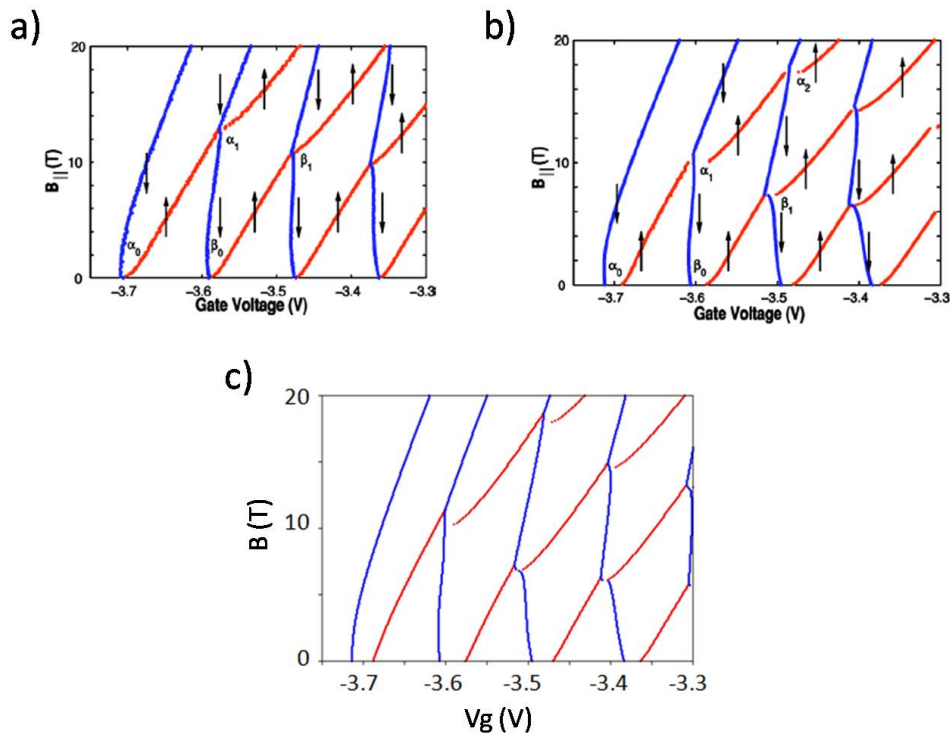


Figura 3.6 – Gráficos da transcondutância na aproximação de (a) Hartree, e de (b) troca e correlação feitos por Berggren *et al* (26). Em (c) temos o gráfico feito por nosso programa trocando o sinal deliberadamente e erroneamente da constante B_2 da Tabela 2.50 usada na parametrização de Attacalite *et al.* do potencial de correlação.

geral, no gráfico de Berggren et al. os análogos 0.7 acontecem de forma qualitativamente semelhante ao experimento. Nas regiões de descontinuidade, por exemplo a demarcada por α_1 na figura 3.6.b, a linha vermelha é descontínua ao contrário da linha azul. Já em nosso gráfico, figura 3.5, nesta mesma região as duas linhas são descontínuas. A linha com spin down segue contínua até o ponto demarcado por um círculo preto onde sofre uma transição abrupta e reaparece logo acima do ponto demarcado por um quadrado preto. O mesmo comportamento ocorre para a linha com spin up, ela segue contínua até o ponto marcado pelo quadrado preto onde sofre uma transição e reaparece logo acima do ponto demarcado pelo círculo preto.

Outra diferença entre os dois gráficos é que na região demarcada por α_0 , temos um desdobramento de spin a campo magnético nulo muito maior que no gráfico de Berggren et al. Esta separação (anomalia 0.7) parece estar mais coerente com o experimento no gráfico de Berggren et al., mas de toda forma, não se espera que existam estas diferenças entre o nosso resultado e o de Berggren et al.. Em ambos os gráficos foi usada a mesma parametrização para o potencial de troca e correlação (parametrização de Attacalite et al., seção 2.2.5). Entramos em contato com os autores do artigo de Berggren et al. e constatamos que eles erraram no sinal da constante B_2 (veja Tabela 2.50, Capítulo 2) ao copiarem a mesma do artigo de Attacalite et al. Na figura 3.6.c temos o gráfico feito trocando deliberadamente o sinal da constante B_2 em nosso programa. Podemos constatar que, com este sinal errado, obtemos os resultados de Berggren et al. Enfatizamos que o nosso resultado (figura 3.5) é o correto.

Analisemos agora o que acontece com os níveis de energia conforme variamos V_g na presença de efeitos de troca e correlação, figura 3.7. Na figura 3.7.a temos as subbandas variando em função de V_g para campo magnético $B = 0$. Neste gráfico, enquanto não temos nenhuma subbanda preenchida as subbandas com spin up e spin down são degeneradas. No momento em que elas tendem a cruzar o nível de Fermi, ocorre a separação em energia entre elas, fazendo com que apenas a subbanda com spin up seja preenchida de início. Isto caracteriza uma transição de fase ferromagnética* onde todos os elétrons que

*Chamo de transição de fase ferromagnética a passagem do sistema de um estado de polarização nula para um de polarização não nula.

ocupam o fio quântico estão polarizados no sentido do campo magnético[†]. Somente depois, para valores de V_g maiores, é que a subbanda com spin down finalmente cruza o nível de Fermi começando a ser preenchida e anulando assim a polarização do fio. Este comportamento das subbandas de spin opostos gera a separação demarcada por α_0 na figura 3.5 onde as linhas up e down começam em valores diferentes de V_g a campo magnético nulo (anomalia 0.7).

O gráfico da figura 3.7.b é feito para um campo magnético $B = 3$ T. Quando não há subbandas ocupadas, a separação entre as subbandas de spins opostos é dada apenas pela energia Zeeman. Esta separação aumenta quando temos mais subbandas de spin up ocupadas do que as de spin down e diminui quando temos números iguais de subbandas de spin opostos ocupadas. Este aumento na separação entre subbandas de spin opostos é causado pelos efeitos de troca entre os elétrons do fio.

Já na figura 3.7.c, que é feita para um campo magnético onde acontece o cruzamento demarcado por α_1 no gráfico da figura 3.5, vemos as transições de fase ferromagnéticas das subbandas ocorrendo. Elas acontecem na figura 3.7.c no ponto demarcado por α_1 onde os níveis de spins opostos se “cruzam” nas proximidades do nível de Fermi[‡]. Nesta região a condutância segue inalterada, pois no ponto em que ocorre a transição de fase os níveis se rearranjam abruptamente de forma que enquanto uma subbanda é populada a outra é despopulada. A figura 3.7.d é feita para campo magnético $B = 9$ T que é um valor de campo maior que aquele onde ocorre o cruzamento demarcado por α_1 na figura 3.5. Se olharmos para as figuras 3.7.a, b, c e d vemos a evolução das subbandas com relação ao campo magnético.

[†]Em nosso modelo esta polarização aparece, pois usamos como condição inicial do cálculo autoconsistente a campo nulo o resultado do potencial do cálculo para um campo maior ($B = 0.05$ T). Isto faz com que o sistema se polarize nas regiões onde há cruzamento de subbandas com o nível de Fermi mesmo a campo nulo.

[‡]A palavra cruzam está entre aspas, pois na transição de fase os níveis sofrem uma inversão, mas de fato não se cruzam.

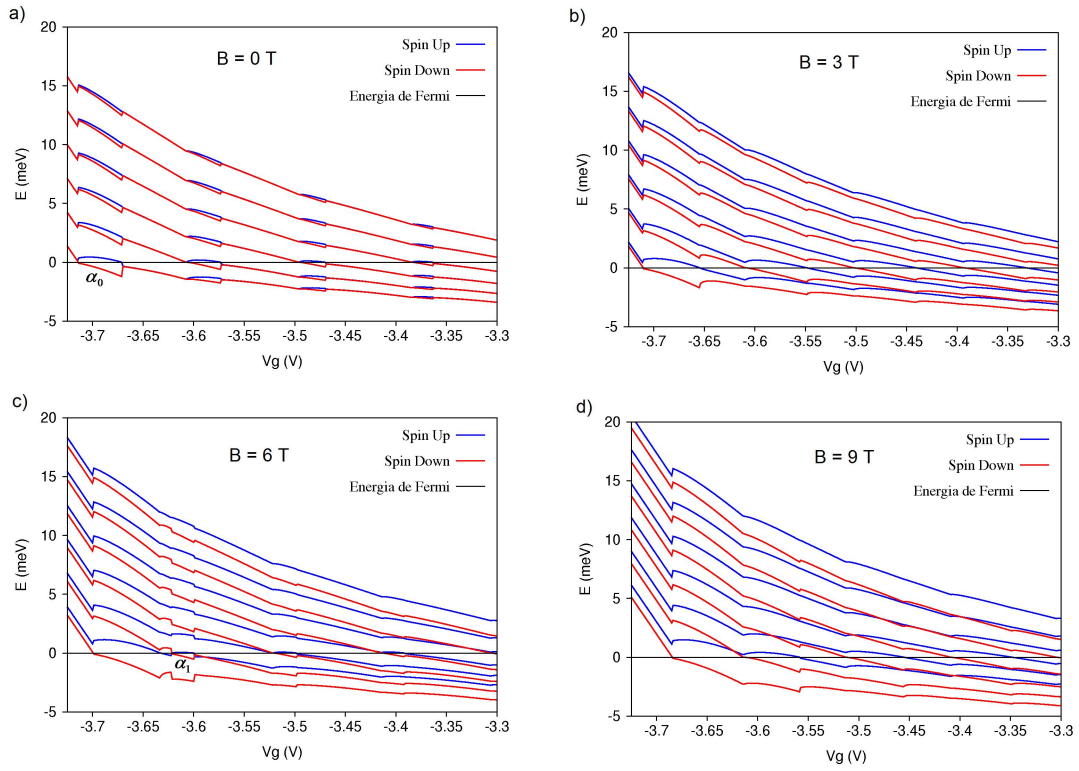


Figura 3.7 – Variação dos níveis de energia com relação ao potencial aplicado aos eletrodos levando em conta efeitos de troca e correlação sem o termo zP_y . Olhando para (a), (b), (c) e (d) vemos a evolução das subbandas com relação ao campo magnético B . Em (a) e (c) os níveis se rearranjam de forma abrupta nos pontos α_0 e α_1 caracterizando transições de fase ferromagnéticas no fio quântico.

3.2 Inclusão do termo zP_y

Nesta seção iremos apresentar nossos resultados levando em consideração o termo $-\omega_c z p_y$ (termo zP_y) na equação 2.9. Este termo é levado em conta em nossos cálculos através de um método perturbativo que está discutido em detalhes na seção 2.1.1.

Na figura 3.8.a temos o gráfico da transcondutância[§] na aproximação de partícula independente levando em conta o termo zP_y . Este gráfico foi retirado da referência (13) onde o modelo usado é o de um fio quântico infinito no regime de densidade de cargas fixa e com potencial confinante parabólico tanto na direção z quanto em y [¶]. Neste mesmo modelo a solução do Hamiltoniano com o termo zP_y é feita exatamente através da escolha

[§]Na verdade é mais justo falar que este gráfico apresenta apenas informação da abertura Zeeman (cada vez que uma subbanda up ou down cruza o nível de Fermi, isto representa um ponto no gráfico), ou seja, não temos nenhuma informação sobre o valor da transcondutância representado nele.

[¶]Ou seja, $v_y = \frac{1}{2}m^*\omega_y^2 y^2$ e $v_z = \frac{1}{2}m^*\omega_z^2 z^2$.

do gauge simétrico (48), onde $A_y = -zB \frac{(\omega_z \omega)^{1/2}}{\omega_y + \omega_z}$ e $A_z = yB \frac{(\omega_y \omega)^{1/2}}{\omega_y + \omega_z}$ são os potenciais vetores nas direções y e z e ω é um parâmetro arbitrário.

Usando este modelo mas com o gauge $A_y = -zB$ definido na seção 2.1 fizemos o mesmo gráfico com o método de expansão das funções de onda para incluir a contribuição do termo zP_y . Este gráfico está representado na figura 3.8.b. Comparando os dois gráficos, figura 3.8.a e b, fica claro que o nosso método para levar em conta o termo zP_y nos fornece resultados idênticos aos exatos. Mas para que o resultado seja muito próximo do exato devemos considerar varias subbandas na direção z na expansão dada pela equação 2.16. Por exemplo no gráfico da figura 3.8.b usamos cinco subbandas na direção z ($n_z = 4$) e vinte e sete subbandas na direção y ($n_y = 26$). Usamos estes mesmos valores de n_y e n_z nos cálculos via DFT. O gráfico em 3.8.b é o único desta dissertação feito no regime de densidade de cargas fixa. Todos os outros gráficos estão no regime de potencial químico constante.

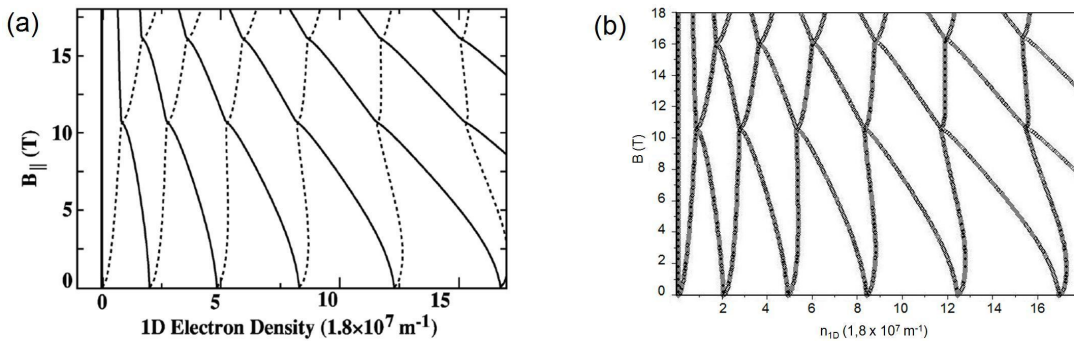


Figura 3.8 – (a) Cálculo da abertura Zeeman com a solução exata do hamiltoniano de um fio quântico infinito com confinamento parabólico tanto na direção z quanto na y (com $\hbar\omega_y = 1.85$ meV e $\hbar\omega_z = 15$ meV), retirado da referência (13). (b) Mesmo cálculo feito via nosso método de expansão das funções de onda para levar em conta o termo zP_y . Neste gráfico usamos $n_y = 26$ e $n_z = 4$ no truncamento da somatória da equação 2.16.

Nos resultados com o termo zP_y nos concentramos em discutir apenas o gráfico com contribuição de troca e correlação. Desta forma, na figura 3.9 temos o gráfico da transcondutância em escala de cores como função do potencial V_g aplicado aos eletrodos e do campo magnético B . Para fazer este gráfico usamos um fator giromagnético $g = -0.44$ que é o valor em *bulk* de GaAs. Em ambas figuras 3.5 e 3.9 constatamos um aumento da separação entre as subbandas de spins opostos. Ou seja, esta separação é maior do que a dada pela

energia Zeeman e é causada pelos efeitos de troca e correlação no fio quântico. De uma forma geral, é como se os efeitos de troca e correlação gerassem uma energia Zeeman com um fator giromagnético maior que o fator giromagnético em *bulk*. Este aumento no fator giromagnético é conhecido (49) e também já foi observado em trabalhos anteriores do grupo (32)-(33) em 2DEG formados tanto em heteroestruturas de CdTe/CdMgTe quanto de GaAs/AlGaAs.

No entanto, no gráfico da figura 3.5 usamos um fator $g = -2.0$ mesmo levando em conta efeitos de troca e correlação. Lá tivemos que usar este fator giromagnético efetivo, pois não levamos em conta o termo zP_y e assim os cruzamentos não aconteciam em valores de campo magnético na faixa do experimento usando $g = -0.44$. Assim sendo, $g = -2.0$ deve ser visto na figura 3.5 como apenas um parâmetro de ajuste. Note que o termo zP_y não depende de spin e nada tem nenhuma relação com aumento de energia Zeeman.

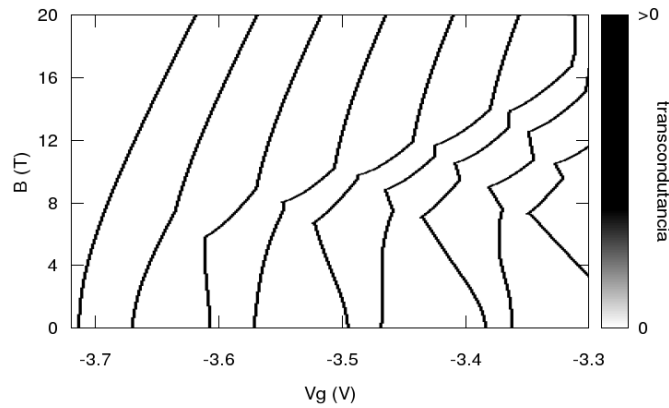


Figura 3.9 – Gráfico em escala de cinza da transcondutância levando em conta troca e correlação via DFT e o termo zP_y no hamiltoniano. Neste gráfico temos uma concordância maior quantitativamente com o experimento. Mas os efeitos são os mesmo qualitativamente que o gráfico levando em conta troca e correlação feito sem o termo zP_y .

Se olharmos para figura 3.9 podemos ver que a faixa de campo onde acontece os cruzamentos e o tipo de estrutura que temos para a transcondutância se assemelha muito mais com o experimento, figura 1.8.b. Ainda assim, nas regiões de cruzamento temos as descontinuidades de ambos os níveis e a anomalia 0.7 muito grande. No entanto, podemos ver que o termo zP_y é de suma importância para uma melhor concordância com o gráfico

experimental da figura 1.8.b.

Para melhor apreciarmos esta concordância, na figura 3.10 refizemos o gráfico da figura 3.9 para uma faixa de V_g entre -3.72 e -3.38 V e de campo magnético B entre 0 e 12 T. Na figura 3.10.b pintamos arbitrariamente (curvas de cor verde) o gráfico da figura 3.10.a nas regiões de cruzamento de subbandas de spins opostos. Fizemos isto para termos uma melhor noção da sua semelhança com o gráfico experimental da figura 3.10.c. Podemos ver que, em exceção as regiões de descontinuidades, o gráfico da figura 3.10.a é bastante semelhante ao gráfico experimental da figura 3.10.c.

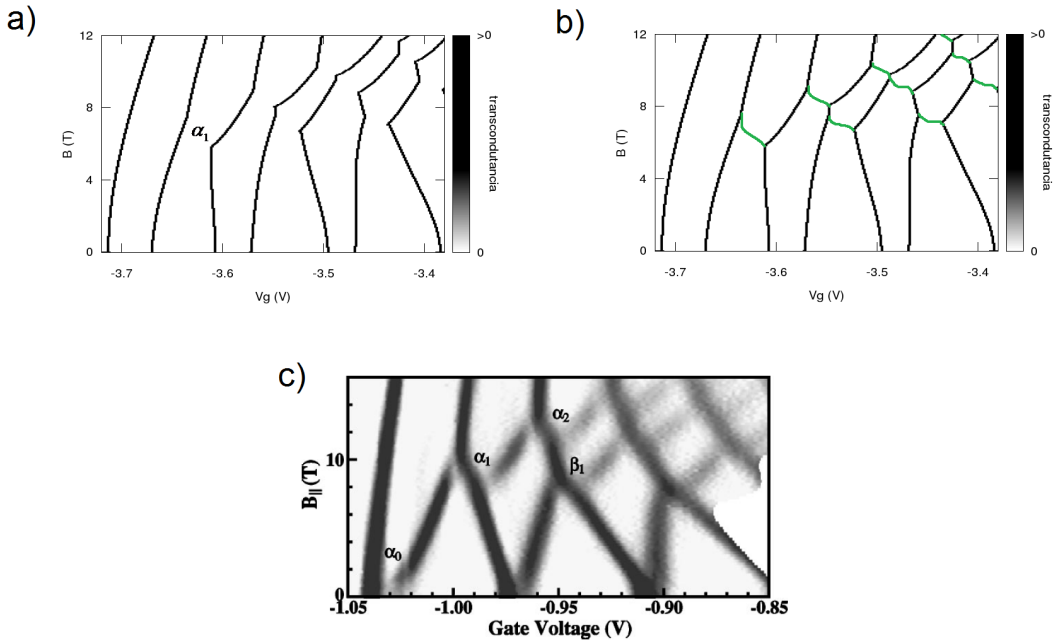


Figura 3.10 – (a) Mesmo gráfico da figura 3.9 feito para uma faixa de potencial V_g entre -3.72 e -3.38 V e de campo magnético B entre 0 e 12 T. (b) Mesma figura com curvas na cor verde feitas manualmente nas regiões de cruzamento de spins opostos. (c) Gráfico experimental retirado da referência (14)

Olhando agora para os gráficos de energia versus V_g , figura 3.11, vemos que o comportamento é semelhante aos gráficos sem o termo zP_y . De forma análoga aos gráficos da figura 3.7, na figura 3.11.a temos uma separação dos níveis de spin up e down quando o número de subbandas ocupadas de spin up é maior que o de subbandas de spin down, caracterizando a anomalia 0.7. Em 3.11.b, enquanto não temos nenhuma subbanda ocupada a separação entre as subbandas de spins opostos é dada apenas pela energia Zeeman. Conforme passamos a ocupar as subbandas esta separação aumenta se temos um número

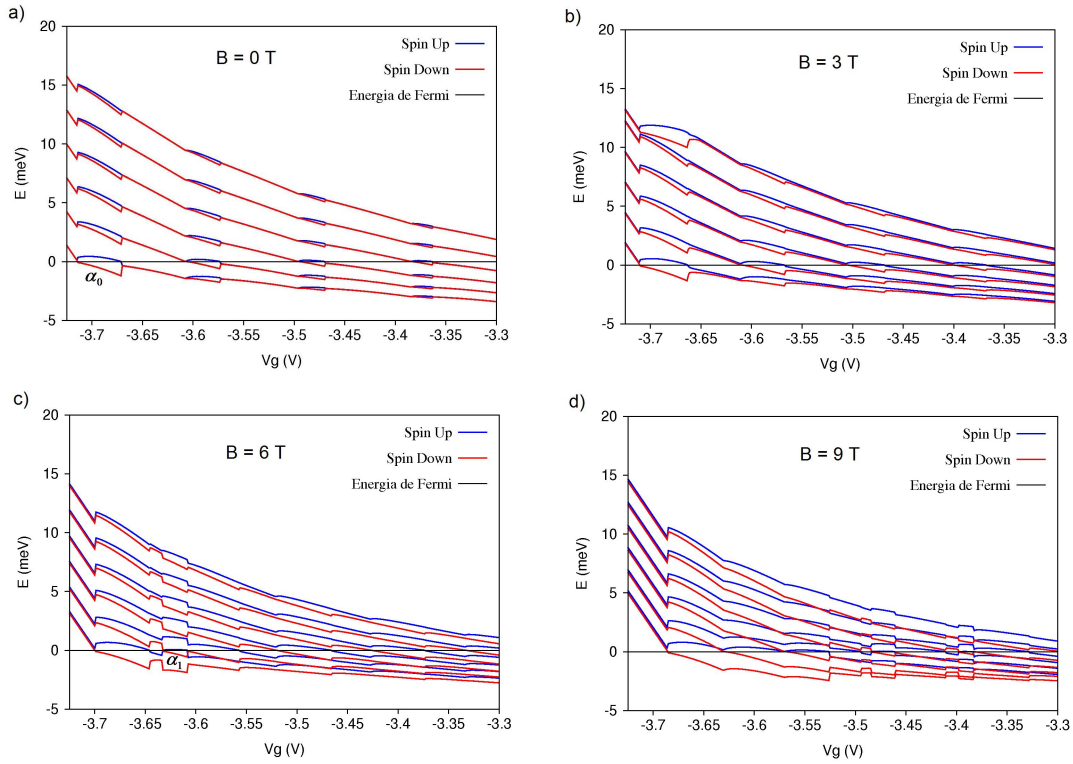


Figura 3.11 – Variação dos níveis de energia com relação ao potencial aplicado aos eletrodos levando em conta efeitos de troca e correlação e o termo zP_y . Olhando para (a), (b), (c) e (d) vemos a evolução das subbandas com relação ao campo magnético B . Em (a) e (c) os níveis se rearranjam de forma abrupta nos pontos α_0 e α_1 caracterizando transições de fase ferromagnéticas no fio quântico.

de subbandas de spin up ocupadas maior que as de spin down. Em 3.11.c, que é feita para um campo magnético $B = 6$ T na região onde ocorre a descontinuidade marcada por α_1 na figura 3.10.a, temos os níveis 1 down e 2 up sofrendo duas transições abruptas na faixa de potencial V_g de -3.65 a -3.60 V. Na figura 3.11.d temos um campo magnético logo após a região demarcada por α_1 na figura 3.10.a.

A figura 3.12.a mostra uma imagem ampliada da região marcado por α_1 na figura 3.10. Para analisarmos o que ocorre com a transcondutância nesta região, na figura 3.12.b temos um gráfico ampliado da figura 3.10.a. No ponto marcado com o círculo preto na figura 3.12.a temos um nível down sendo populado. Neste ponto a condutância aumenta de e^2/h para $2e^2/h$, o que nos fornece uma derivada positiva e, conseqüentemente, um ponto positivo na região marcada pelo círculo preto no gráfico da transcondutância, figura 3.12.b. No ponto marcado com o triângulo preto temos a transição de fase acontecendo^{||}.

^{||}Em nosso sistema as transições de fase são acompanhadas por rearranjos abruptos dos níveis de

Neste ponto um nível up é populado e um nível down é despopulado e, sendo assim, a condutância logo antes e logo depois deste ponto é a mesma. Isto nos fornece uma derivada nula, e por isso, a região marcada com um triângulo preto na figura 3.12.b é branca. No ponto marcado pelo quadrado preto temos outra transição de fase e novamente, como na região marcada pelo círculo, temos o nível com spin down sendo populado. Neste ponto a condutância aumenta de $2e^2/h$ para $3e^2/h$ e, conseqüentemente, teremos uma derivada positiva da condutância, o que nos fornece um ponto positivo na região representada pelo quadrado preto da figura 3.12.b.

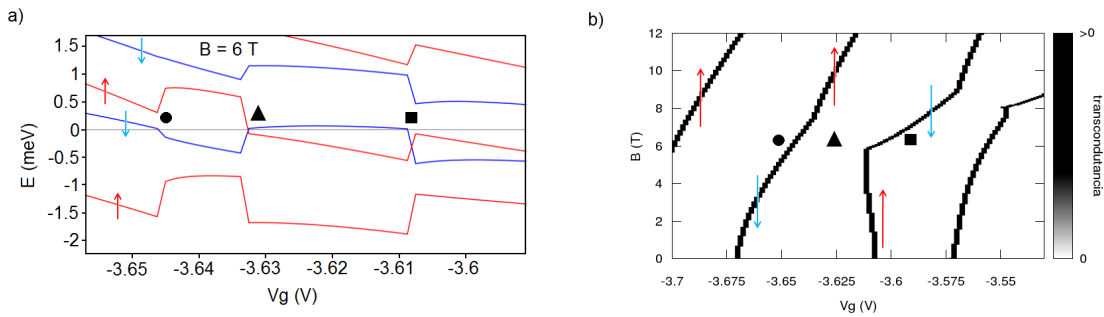


Figura 3.12 – (a) Zoom da região entre -3.65 e -3.6 da figura 3.11.c. (b) Zoom da mesma região da figura 3.10.a.

Na figura 3.13.a temos ampliada a região marcada por α_1 na figura 3.10.c e na figura 3.13.b temos uma figura esquemática do que acontece, segundo os experimentais, com os níveis de energia nesta região. Esta figura foi feita interpretando o que os experimentais escrevem em trabalhos publicados. Em linhas gerais o que está representado nesta figura é que, logo antes do ponto marcado com um círculo amarelo, temos o nível down acima do nível de Fermi e logo depois deste ponto o nível down fica “preso” (*pinned*) ao nível de Fermi. Neste ponto o nível down passa de um estado não populado para um estado populado, mas não totalmente. Desta forma, a condutância passa de e^2/h para $3e^2/2h$ e assim permanece até que no ponto marcado com um triângulo amarelo um nível up atravessa o nível de Fermi. Neste instante a condutância passa de $3e^2/2h$ para $5e^2/2h$ e assim permanece até que no ponto marcado com um quadrado amarelo finalmente o nível down se popula totalmente. Com isto, a condutância passa de $5e^2/2h$ para $3e^2/h$. Ou seja, nos três pontos demarcados pelas figuras geométricas de cor amarela teremos um energia.

valor positivo da transcondutância, figura 3.13.b. Comparando as figuras 3.12.a e 3.13.b esta descrição não corresponde ao comportamento dos níveis de energia calculados via nosso modelo levando em conta efeitos de troca e correlação.

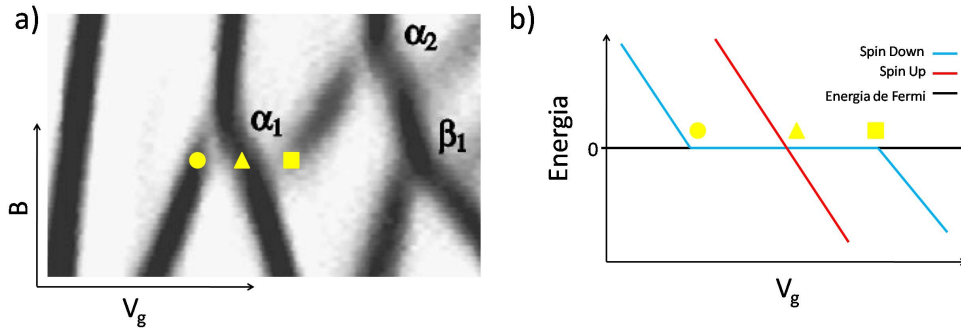


Figura 3.13 – (a) Zoom do primeiro cruzamento que ocorre na figura 3.10.c. (b) Figura esquemática de como os experimentais acreditam que os níveis de energia se comportam próximo ao nível de Fermi.

Da mesma forma, nas regiões de cruzamento nosso gráfico da transcondutância, figura 3.12.b, é diferente do gráfico experimental, figura 3.13.a. Um dos problemas pode estar no fato de não termos em nosso modelo nenhum mecanismo que alargue os níveis de energia do sistema. Isto faz com que o nível sempre esteja perto do nível de Fermi, mas nunca numericamente em cima dele. Uma das possíveis maneiras de se provocar algum tipo de alargamento na estrutura eletrônica do fio quântico é levar em conta a presença de impurezas em nossos cálculos. Mas não tratamos deste caso neste trabalho devido à sua complexidade.

Outra forma de fazer com que os níveis que estão perto do nível de Fermi contribuam para alguma variação na condutância é levar em conta temperatura ou coeficientes de transmissão mais realísticos, diferente de $T_j = \theta(\epsilon_f - \epsilon_j)$ em nossos cálculos (ver seção 2.5).

3.2.1 Temperatura

A temperatura em que o experimento é feito é muito baixa, entre 50 mK e 100 mK e desta forma somente os níveis que estão bem próximos ao nível de Fermi é que contribuirão para alguma variação na condutância do fio. Para vermos o que a temperatura muda em

nossos resultados, na figura 3.14 temos um gráfico da transcondutância levando em conta uma temperatura de 50 mK no cálculo da condutância.

Podemos observar que nas regiões onde ocorrem as transições de fase temos uma maior parte de valores negativos (regiões em vermelho) do que positivos da transcondutância. Estas regiões de derivada negativa surgem pois para esta temperatura a condutância sente a pequena variação positiva da energia do nível down na região entre o triângulo e o quadrado preto da figura 3.12.a**. No entanto, a condutância não sente a variação negativa da energia do nível up nesta mesma região, pois este nível já está muito longe do nível de Fermi. Ou seja, a temperatura gera apenas valores negativos na transcondutância nas regiões dos cruzamentos diferente do gráfico experimental (3.10.c).

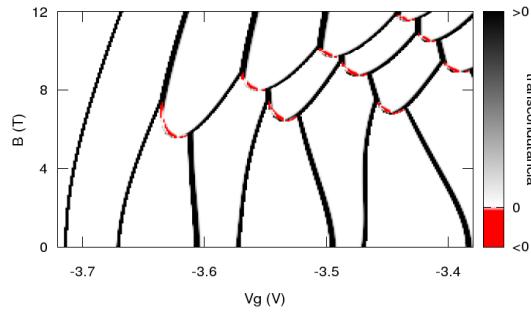


Figura 3.14 – (a) Gráfico em escala de cores da transcondutância levando em conta troca e correlação via DFT e o termo zP_y calculada à temperatura de 50 mK. As regiões com valores positivos da transcondutância estão em escala de cinza e as regiões com valores negativos estão em cor vermelha.

3.2.2 Contato do fio quântico com os reservatórios

O fato do fio quântico estar ligado aos reservatórios (2DEG's) em suas extremidades faz com que tenhamos um coeficiente de transmissão diferente de $T_j = \theta(\epsilon_f - \epsilon_j)$. O fato do fio ter um certo confinamento na direção x gera uma certa probabilidade dos elétrons serem transmitidos através do mesmo. Para um modelo de *quantum point contact*, com confinamento parabólico na direção x , ou seja $v_x = -\frac{1}{2}m^*\omega_x^2x^2$ (modelo de sela), o

**Me refiro aqui a variação na energia em relação a V_g . Se a variação na energia for positiva próxima ao nível de Fermi, teremos uma variação negativa na condutância entre estes mesmos valores de V_g .

coeficiente de transmissão é dado por (ver referência (50)):

$$T_j = \frac{1}{1 + e^{\frac{2\pi(\epsilon_j - \epsilon_f)}{\hbar\omega_x}}} \quad (3.1)$$

onde j representa os números quânticos orbitais e de spin.

Na figura 3.15 temos o gráfico da transcondutância calculada com $\hbar\omega_x \cong 0.54$ meV. Podemos ver que temos estruturas com valores positivos surgindo entre os cruzamentos, mas ainda temos algumas regiões com valores negativos (regiões em vermelho).

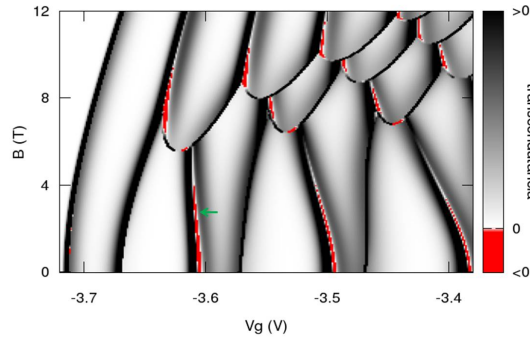


Figura 3.15 – Gráfico em escala de cores da transcondutância calculada com o coeficiente de transmissão dado pela equação 3.1, com $\hbar\omega_x \cong 0.54$ meV. Neste gráfico levamos em conta troca e correlação via DFT e o termo zP_y . As regiões com valores positivos da transcondutância estão em escala de cinza e as regiões com valores negativos estão em cor vermelha.

As estruturas positivas nas regiões de discontinuidades surgem pois além da variação positiva do nível de energia down na região entre o triângulo e o quadrado na figura 3.12.a, a condutância sente a variação negativa do nível de energia up nesta mesma região devido ao coeficiente de transmissão dado pela equação 3.1. Como a variação negativa do nível up é maior que a variação positiva do nível down, quando somarmos as contribuições destes dois níveis na transcondutância teremos um valor positivo para a mesma nesta região.

Para entender por que as regiões negativas surgem no gráfico da transcondutância podemos olhar, por exemplo, para a região marcada por uma seta verde na figura 3.11.b. Quando a subbanda up cruza o nível de Fermi, a subbanda de spin down sofre uma variação positiva. Esta variação positiva é maior que a variação negativa da subbanda de spin up, sendo assim a soma das duas contribuições resultará em uma variação negativa

para a condutância. Esta variação negativa na condutância resulta em um valor negativo na região (de cor vermelha) marcada por uma seta verde no gráfico da transcondutância, figura 3.15. As demais regiões negativas neste gráfico surgem pelo mesmo tipo de comportamento das subbandas próximas ao nível de Fermi. Tanto os valores positivos no gráfico da transcondutância nas regiões de cruzamento, quanto os negativos são gerados pelo coeficiente de transmissão do modelo de sela, equação 3.1, que tem a forma semelhante à função de Fermi e faz que os níveis que estão próximos ao nível de Fermi contribuam para a condutância.

3.2.3 A anomalia 0.7 gigante

Os dois fatores, temperatura e coeficiente de transmissão, produziram diferenças qualitativas nas regiões onde temos os análogos 0.7. Ainda assim, todas as figuras de transcondutância levando em conta troca e correlação apresentam uma anomalia 0.7 gigante. Este problema em nosso modelo pode estar diretamente relacionado com a LSDA 2D.

Como temos uma anomalia 0.7 gigante e como em nosso modelo ela está diretamente relacionada com os efeitos de troca e correlação no fio quântico, podemos chegar a conclusão que estamos superestimando estes efeitos em nosso modelo. Também podemos relacionar a isto o fato dos cruzamentos na figura 3.10.a estarem acontecendo em campos magnéticos mais baixos comparados com o gráfico experimental, figura 3.10.c. Desta forma, em uma tentativa de diminuir estes efeitos em nosso modelo multiplicamos a energia de troca $\epsilon_x(r_s, \xi)$, dada pela equação 2.46, por uma constante $\alpha_x < 1^{\dagger\dagger}$.

Nas figuras 3.16.a e b temos os gráficos da transcondutância feitos, respectivamente, com e sem o termo zP_y levado em conta nos cálculos da estrutura eletrônica do fio quântico. Neles usamos $\alpha_x = 0.8$ para diminuir os efeitos de troca e usamos também o coeficiente de transmissão dado pela equação 3.1. As regiões com valores negativos na transcondutância estão representadas em vermelho.

Em ambos os gráficos da figura 3.16 conseguimos uma separação dos níveis up de

^{††}Fizemos isto de forma totalmente arbitrária para testar se de fato a LSDA 2D estava superestimando os efeitos de troca em nossos cálculos. Isto é sabido na literatura (ver referência (51)).

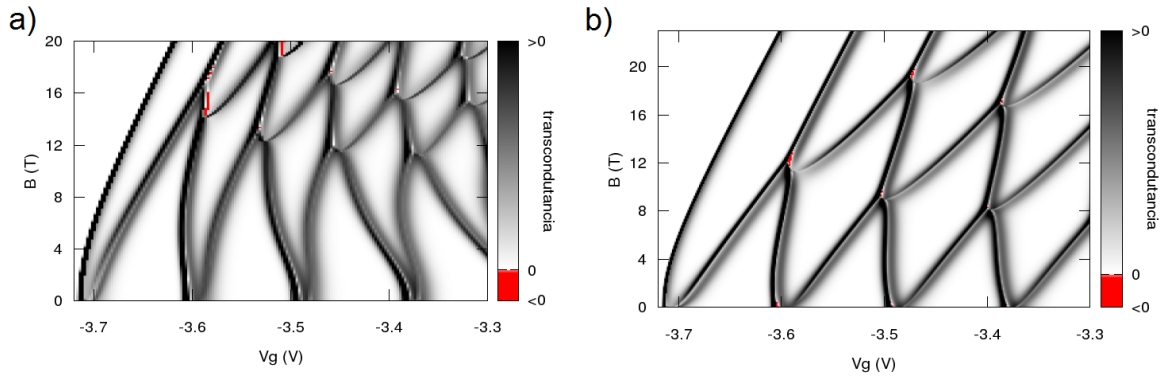


Figura 3.16 – Gráfico em escala de cores da transcondutância diminuindo os efeitos de troca (a) levando em conta o termo zP_y e (b) sem levar em conta o termo zP_y . Estes gráficos foram calculados à temperatura zero e coeficiente de transmissão dado pela equação 3.1, com $\hbar\omega_x \cong 0.27$ meV. Em (a) o fator giromagnético usado foi de $g = -0.44$ e em (b) temos $g = -2.0$. As regiões com valores positivos da transcondutância estão em escala de cinza e as regiões com valores negativos estão em cor vermelha.

down a campo magnético nulo (anomalia 0.7) menor em relação aos gráficos das seções anteriores e com isso mais próximo do gráfico experimental, figura 3.10. Também, nas regiões de cruzamento vemos nitidamente uma das linhas contínua e outra descontínua em ambos os gráficos. No entanto, comparando os gráficos das figuras 3.15 e 3.16.a podemos ver que diminuindo os efeitos de troca perdemos a concordância do comportamento geral da transcondutância comparado com o experimento.

Como este modelo fenomenológico consegue reproduzir uma anomalia 0.7 mais próxima ao experimento podemos concluir que a LSDA 2D superestima os efeitos de troca neste sistema. Ainda mais, como o gráfico levando em conta o termo zP_y neste modelo fenomenológico (figura 3.16.a) perde a concordância no comportamento geral da transcondutância comparado com o experimento, talvez a LSDA 2D superestime os efeitos de troca principalmente nas regiões onde ocorrem os cruzamentos nos gráficos da transcondutância das seções anteriores.

3.3 Pontos relevantes

Depois de expor todos os nossos resultados devemos deixar claro ao leitor alguns detalhes importantes e aproximações em nosso modelo:

1) Nosso modelo para a estrutura eletrônica considera que o fio quântico seja infinito. Isto ignora totalmente o fato do fio estar conectado a reservatórios em suas extremidades. No entanto, levamos em conta a presença dos reservatórios de forma aproximada através do coeficiente de transmissão dado pelo modelo de sela, seção 3.2.2. Mesmo assim, para uma abordagem mais completa deve-se levar em conta explicitamente os contatos tanto no cálculo da estrutura eletrônica do fio, quanto no cálculo da condutância.

2) Levamos em conta os efeitos de muitos corpos de forma aproximada na direção de confinamento do 2DEG (direção z). Isto é feito para manter a simplicidade nos cálculos numéricos. Fazendo uma média na direção z no cálculo da densidade de partículas, equação 2.52 (seção 2.3), e assim consideramos um modelo 2D da SDFT para nosso problema.

3) Nos cálculos via SDFT usamos os autovalores de Kohn-Sham como sendo os níveis de energia de “quase partícula” do sistema. Dentro da teoria do funcional da densidade, isto não é formalmente justificável (mas amplamente utilizado na literatura, por exemplo no cálculo de propriedades óticas de semicondutores). A boa descrição de experimento contitui-se na única justificativa (a posteriori) para este procedimento.

4) Usamos os autoestados de Kohn-Sham da SDFT no cálculo da condutância dentro da formulação de Landauer-Büttiker que são duas teorias totalmente descopladas. Enquanto a DFT é uma teoria para estrutura eletrônica de sistemas quânticos interagentes, a teoria de Landauer-Büttiker é para transporte em sistemas quânticos não interagentes.

Apesar de todas estas simplificações e aproximações injustificáveis a priori, o nosso model, surpreendentemente, fornece resultados com uma boa concordância com o experimento de Graham et al. (14).

Capítulo 4

Conclusões

Calculamos a trancondutância para um fio quântico como função do potencial aplicado aos eletrodos e do campo magnético aplicado paralelo ao fio. Fizemos isto levando em conta efeitos de troca e correlação via modelo bidimensional da teoria do funcional da densidade (DFT) na aproximação de densidade local dependente de spin (LSDA) bidimensional. Além disto, nosso modelo inclui o termo zP_y nos cálculos de DFT via método perturbativo, seção 2.1.1. Este termo é desprezado nos modelos existentes na literatura que estudam o comportamento dos análogos 0.7.

Nos resultados com coeficiente de transmissão $T_j = \theta(\epsilon_f - \epsilon_j)$ não conseguimos reproduzir os análogos 0.7 de forma qualitativamente próxima ao experimento. No entanto, através do coeficiente de transmissão dado pelo modelo de sela, seção 3.2.2, obtemos resultados com uma boa concordância com o experimento de Graham et al (14). Podemos ver esta concordância no gráfico da figura 3.15 que é o principal resultado obtido nesta dissertação. Nele conseguimos reproduzir quase todas as características do gráfico experimental da figura 3.10.c.

Já sobre a anomalia 0.7, nossos cálculos apresentam uma separação muito grande entre subbandas de spins opostos a campo magnético zero. Isto pode indicar que os efeitos de troca são superestimados pela LSDA 2D. Contudo, nosso modelo é muito simples para podermos afirmar isto com clareza, ou seja, isto é apenas uma suposição do que pode estar ocorrendo. Esta suposição é alimentada pelo nosso resultado obtido multiplicando o potencial de troca arbitrariamente por uma constante $\alpha_x < 0$, figura 3.16. Isto fez com

que os efeitos de troca fossem diminuídos e, com isto, conseguimos uma anomalia 0.7 mais próxima do experimento. No entanto, comparando as figuras 3.15 e 3.16.a podemos ver que o modelo fenomenológico perde a concordância com o experimento, figura 3.10.c, nas regiões de $B > 0$ do gráfico da transcondutância.

É importante salientar que a concordância com o experimento em nossos resultados é devido à inclusão do termo zP_y em nossos cálculos via DFT, ver seção 3.2. Os modelos em DFT presentes na literatura usam um fator giromagnético efetivo para conseguir cruzamentos entre subbandas de spins opostos a campos magnéticos razoáveis em relação ao experimento. Em nosso modelo levamos em conta os efeitos de troca e correlação (além de Hartree) junto com o termo zP_y . Com isto, conseguimos cruzamentos de subbandas de spins opostos próximos aos do experimento usando um fator giromagnético $g = -0.44$ que é o valor correto para o GaAs.

Como perspectiva de trabalhos futuros, um modelo mais completo que inclua os contatos no cálculo tanto da condutância quanto da estrutura eletrônica do sistema deve ser essencial. Também um modelo tridimensional de DFT deve ser importante para levar em conta os efeitos de muitos corpos de forma mais fiel do que um modelo bidimensional. No entanto, nosso modelo tenta explicar os efeitos anômalos da condutância de fios quânticos interagentes através de um modelo simples (ver seção 3.3) que nos proporciona um custo computacional baixo. É um desafio aliar modelos mais completos como os citados acima a um custo computacional razoável.

Referências

- 1 WOLF, S. A.; CHITCHELKANOVA, A. Y.; TREGER, D. M. Spintronics - a retrospective and perspective. *IBM Journal of Research and Development*, v. 50, n. 1, p. 101-110, 2006.
- 2 BAIBICH, M. N.; BROTO, J. M.; FERT, A.; NGUYEN VAN DAU, F.; PETROFF, F. Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices. *Physical Review Letters*, v. 61, n. 21, p. 2472-2475, 1988.
- 3 BINASCH, G.; GRÜNBERG, P.; SAURENBACH, G.; ZINN, W. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Physical Review B*, v. 39, n. 7, p. 4828-4830, 1989.
- 4 Scientific background on the nobel prize in physics 2007 : the discovery of giant magnetoresistance. Disponível em: <http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2007/press.html>. Acesso em : 17Nov.2009.
- 5 DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, v. 56, n. 7, p. 665-667, 1990.
- 6 KOO, H. C.; KWON, J. H.; EOM, J.; CHANG, J.; HAN, S. H.; JOHNSON, M. Control of spin precession in a spin-injected field effect transistor. *Science*, v. 325, n. 5947, p. 1515-1518, 2009.
- 7 IHNATSENKA, S.; ZOZOULENKO, I. V. Spin polarization of edge states and the magnetosubband structure in quantum wires. *Physical Review B*, v. 73, n. 7, p. 075331-1 - 075331-14, 2006.
- 8 VAN WEES, B. J.; VAN HOUTEN, H.; BEENAKKER, C. W. J.; WILLIAMSON, J. G.; KOUWENHOVEN, S. P.; VAN der MAREL, D.; FOXON, C. T. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Physical Review Letters*, v. 60,

n. 9, p. 848-850, 1988.

9 WHARAM, D. A.; THORNTON, T. J.; NEWBURY, R.; PEPPER, M.; AHMED, H.; FROST, J. E. F.; HASKO, D. G.; PEACOCK, D. C.; RITCHIE, D. A.; JONES, G. A. C. One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance. *Journal of Physics C: solid state physics*, v. 21, n. 8, p. L209-L214, 1988.

10 OGATA, M.; FUKUYAMA, H. Collapse of Quantized Conductance in a Dirty Tomonaga-Luttinger Liquid. *Physical Review Letters*, v. 73, n. 3, p. 468-471, 1994.

11 TARUCHA, S.; HONDA, T.; SAKU, T. Reduction of quantized conductance at low temperatures observed in 2 to 10 μm -long quantum wires. *Solid State Communications*, v. 94, n. 6, p. 413-418, 1995.

12 THOMAS, K. J.; NICHOLLS, J. T.; SIMMONS, M. Y.; PEPPER, M.; MACE, D. R.; RITCHIE, D. A. Possible spin polarization in a one-dimensional electron gas. *Physical Review Letters*, v. 77, n. 1, p. 135-138, 1996.

13 GRAHAM, A. C.; THOMAS, K. J.; PEPPER, M.; COOPER, N. R.; SIMMONS, M. Y.; RITCHIE, D. A. Interaction effects at crossings of spin-polarized one-dimensional subbands. *Physical Review Letters*, v. 91, n. 13, p. 136404-1 - 136404-4, 2003.

14 GRAHAM, A. C.; THOMAS, K. J.; PEPPER, M.; SIMMONS, M. Y.; RITCHIE, D. A.; BERGGREN, K. -F.; JAKSCH, P.; DEBNAROVA, A.; YAKIMENKO, I. I. 0.7 Analogue structures and exchange interactions in quantum wires. *Solid State Communications*, v. 131, n. 9, p. 591-597, 2004.

15 GRAHAM, A. C.; PEPPER, M.; SIMMONS, M. Y.; RITCHIE, D. A. Anomalous spin-dependent behavior of one-dimensional subbands. *Physical Review B*, v. 72, n. 19, p. 193305-1 - 193305-4, 2005.

16 GRAHAM, A. C.; SAWKEY, D. L.; PEPPER, M.; SIMMONS, M. Y.; RITCHIE, D. A. Energy-level pinning and the 0.7 spin state in one dimension: GaAs quantum wires studied using finite-bias spectroscopy. *Physical Review B*, v. 75, n.3, p. 035331-1 - 035331-6, 2007.

17 GRAHAM, A. C.; SIMMONS, M. Y.; RITCHIE, D. A.; PEPPER, M. Anticrossing of spin-split subbands in quasi-one-dimensional wires. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 22, p. 226804-1 - 226804-4, 2008.

-
- 18 KOOP, E. J.; LERESCU, A. I.; LIU, J.; VAN WEES, B. J.; REUTER, D.; WIECK, A. D.; VAN der WAL, C. H. The influence of device geometry on many-body effects in quantum points contacts: Signatures of the 0.7 anomaly, exchange and Kondo. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, v. 20, n. 6, p. 433-441, 2007.
- 19 SHELYKH, I. A.; SOSENAU da COSTA, M.; SERIDONIO, A. C. Fractional quantization of ballistic conductance in 1D electron and hole systems. *Journal of Physics: condensed matter*, v. 20, n. 16, p. 164214-1 - 164214-9, 2008.
- 20 BRUUS, H.; CHEIANOV, V. V.; FLENSBERG, K. The anomalous 0.5 and 0.7 conductance plateaus in quantum point contacts. *Physica E: low-dimensional systems and nanostructures*, v. 10, n. 1, p. 97-102.
- 21 REILLY, D. J.; BUEHLER, T. M.; O'BRIEN, J. L.; HAMILTON, A. R.; DZURAK, A. S.; CLARK, R. G.; KANE, B. E.; PFEIFFER, L. N.; WEST, K. W. Density-dependent spin polarization in ultra-low-disorder quantum wires. *Physical Review Letters*, v. 89, n. 24, p. 246801-1 - 246801-4, 2002.
- 22 REILLY, D. J. Phenomenological model for the 0.7 conductance feature in quantum wires. *Physical Review B*, v. 72, n. 3, p. 033309-1 - 033309-4, 2005.
- 23 REILLY, D. J.; ZHANG, Y.; DICARLO, L. Phenomenology of the 0.7 conductance feature. *Physica E*, v. 34, n. 2, p. 27-30, 2006.
- 24 WANG, C. -K.; BERGGREN, K. -F. Spin splitting of subbands in quasi-one-dimensional electron quantum channels. *Physical Review B*, v. 54, n. 20, p. 14257-14260, 1996.
- 25 STARIKOV, A. A.; YAKIMENKO, I. I.; BERGGREN, K. -F. Scenario for the 0.7-conductance anomaly in quantum point contacts. *Physical Review B*, v. 67, n. 23, p. 235319-1 - 235319-8, 2003.
- 26 BERGGREN, K.; JAKSCH, P.; YAKIMENKO, I. Effects of electron interactions at crossings of Zeeman-split subbands in quantum wires. *Physical Review B*, v. 71, n. 11, p. 115303-1 - 115303-5, 2005.
- 27 JAKSCH, P.; YAKIMENKO, I.; BERGGREN, K. -F. From quantum point contacts to quantum wires: Density-functional calculations with exchange and correlation effects. *Physical Review B*, v. 74, n. 23, p. 235320-1 - 235320-9, 2006.

- 28 CRONENWETT, S. M.; LYNCH, H. J.; GOLDHABER-GORDON, D.; KOUWENHOVEN, L. P.; MARCUS, C. M.; HIROSE, K.; WINGREEN, N. S.; UMANSKY, V. Low-temperature fate of the 0.7 structure in a point contact: a Kondo-like correlated state in an open system. *Physical Review Letters*, v. 88, n. 22, p. 226805-1 - 226805-4, 2002.
- 29 MEIR, Y.; HIROSE, K.; WINGREEN, N. S. Kondo model for the “0.7 anomaly” in transport through a quantum point contact. *Physical Review Letters*, v. 89, n. 19, p. 196802-1 - 196802-4, 2002.
- 30 REJEC, T.; MEIR, Y. Magnetic impurity formation in quantum point contacts. *Nature*, v. 442, n. 7105, p. 900-903, 2006.
- 31 MASLOV, D. L.; STONE, M. Landauer conductance of Luttinger liquids with leads. *Physical Review B*, v. 52, n. 8, p. R5539-R5542, 1995.
- 32 FREIRE, H. J. P.; EGUES, J. C. Hysteretic Resistance Spikes in Quantum Hall Ferromagnets without Domains. *Physical Review Letters*, v. 99, n. 2, p. 026801-1 - 026801-4, 2007.
- 33 FERREIRA, G. J.; FREIRE, H. J. P.; EGUES, J. C. Ringlike structures in the density-magnetic-field ρ_{xx} diagram of two-subband quantum Hall systems. *Physica Status Solidi (c)*, v. 3, n. 12, p. 4364-4367, 2006.
- 34 BASTARD, G. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructure*. New York: Halsted Press, 1988.
- 35 LUTTINGER, J. M.; KOHN, W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Physical Review*, v. 97, n. 4, p. 869-883, 1955.
- 36 CALSAVERINI, R. S.; BERNARDES, E.; EGUES, J. C.; LOSS, D. Intersubband-induced spin-orbit interaction in quantum wells. *Physical Review B*, v. 78, n. 15, p. 155313-1 - 155313-16, 2008.
- 37 HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, v. 136, n. 3B, p. 864-871, 1964.

-
- 38 KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, v. 140, n. 4A, p. 1133-1138, 1965.
- 39 JACKSON, J. D. *Classical electrodynamics*, 3rd ed. New York: Wiley, 1999.
- 40 GIULIANI, G. F.; VIGNALE, G. *Quantum theory of the electron liquid*. New York: Cambridge University Press, 2005.
- 41 ATTACCALITE, C.; MORONI, S.; GORI-GIORGI, P.; BACHELET, B. Correlation energy and spin polarization in the 2D electron gas. *Physical Review Letters*, v. 88, n. 25, p. 256601-1 - 256601-4, 2002.
- 42 ATTACCALITE, C.; MORONI, S.; GORI-GIORGI, P.; BACHELET, B. Erratum: Correlation energy and spin polarization in the 2D electron gas. *Physical Review Letters*, v. 91, n. 10, p. 109902, 2003.
- 43 GNU Scientific Library - Reference Manual. Disponível em: <<http://www.gnu.org/software/gsl/>>. Acesso em: 10 Nov. 2009.
- 44 DATTA, S. *Electronic transport in mesoscopic systems*. New York: Cambridge University Press, 1995.
- 45 NITTA, J.; AKAZAKI, T.; TAKAYANAGI, H.; ENOKI, T. Gate control of spin-orbit interaction in an inverted $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ heterostructure. *Physical Review Letters*, v. 78, n. 7, p. 1335-1338, 1997.
- 46 KOGA, T.; NITTA, J.; AKAZAKI, T.; TAKAYANAGI, H. Rashba spin-orbit coupling probed by the weak antilocalization analysis in InAlAs/InGaAs/InAlAs quantum wells as a function of quantum well asymmetry. *Physical Review Letters*, v. 89, n. 4, p. 046801-1 - 046801-4, 2002.
- 47 KOGA, T.; SEKINE, Y.; NITTA, J. Experimental realization of a ballistic spin interferometer based on the Rashba effect using a nanolithographically defined square loop array. *Physical Review B*, v. 74, n. 4, p. 041302-1 - 041302-4, 2006.
- 48 SCHUH, B. Algebraic solution of a non-trivial oscillator problem. *Journal of Physics A: mathematical and general*, v. 18, n. 5, p. 803-807, 1985.

49 ANDO, T.; FOWLER, A. B.; STERN, FRANK. Eletronic properties of two-dimensional systems. *Reviews of Modern Physics*, v. 54, n. 2, p. 437-672, 1982.

50 BÜTTIKER, M. Quantized transmission of a saddle-point constriction. *Physical Review B*, v. 41, n. 11, p. 7906-7909, 1990.

51 KÜMMEL, S.; KRONIK, L. Orbital-dependent density functionals: Theory and applications. *Review of Modern Physics*, v. 80, n. 1, p. 3-60, 2008.

52 BRACEWELL R. *The Fourier transform and its applications*, 3rd ed. Boston: McGraw Hill, 2000.

Apêndice A

Potencial gerado pelos eletrodos

Aqui determinamos o potencial de *split gate* $\Phi_{sg}(x, y, z)$ gerado pelos eletrodos na posição do 2DEG, equação 2.6, que é utilizado na seção 2.1. Uma forma de fazer isto é trabalhar com a equação de Laplace no espaço recíproco da posição. Desta forma fazendo a transformada de Fourier do potencial $\Phi_{sg}(\vec{r}, 0)$ para $\tilde{\Phi}_{sg}(\vec{q}, 0)$, onde \vec{r} representa o vetor bidimensional no plano xy . A dependência em z deve ser uma exponencial decrescente para satisfazer a condição de contorno $\left. \frac{\partial \Phi_{sg}}{\partial z} \right|_{z \rightarrow \infty} = 0$. Desta forma temos

$$\tilde{\Phi}_{sg}(\vec{q}, z) = \tilde{\Phi}_{sg}(\vec{q}, 0)e^{-|qz|} = F\{\Phi_{sg}(\vec{r}, 0)\}F\{\Phi_{sg}(\vec{r}, z)\}. \quad (1)$$

Esta multiplicação de transformadas de Fourier é equivalente a uma convolução no espaço real. Com isso, podemos escrever $\Phi_{sg}(\vec{r}, z)$ como sendo

$$\Phi_{sg}(\vec{r}, z) = (f * g)(\vec{r}, z) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{r}', z)g(\vec{r} - \vec{r}', z)d\vec{r}', \quad (2)$$

onde $f(\vec{r}, z)$ e $g(\vec{r}, z)$ são definidos como

$$f(\vec{r}, z) = IF\{\tilde{\Phi}_{sg}(\vec{q}, 0)\} = \Phi_{sg}(\vec{r}, 0), \quad (3)$$

$$g(\vec{r}, z) = IF\{\tilde{\Phi}_{sg}(\vec{q}, z)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|qz|} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} d\vec{q}. \quad (4)$$

onde IF representa a transformada de Fourier inversa. Podemos calcular $g(\vec{r}, z)$ a partir de 4 da seguinte forma:

$$g(\vec{r}, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-|qz|} e^{iqr \cos \theta} q dq d\theta, \quad (5)$$

$$g(\vec{r}, z) = \int_0^\infty e^{-|qz|} \underbrace{\left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} e^{iqr \cos \theta} d\theta \right\}}_{J_0(qr \cos \theta)} q dq, \quad (6)$$

$$g(\vec{r}, z) = \int_0^\infty e^{-|qz|} J_0(qr \cos \theta) q dq. \quad (7)$$

onde $J_0(x)$ é a função de Bessel de ordem zero. A integral na equação 7 está tabelada na página 249 da referência (52) e sua solução é

$$g(\vec{r}, z) = \frac{|z|}{2\pi(z^2 + r^2)^{3/2}}. \quad (8)$$

Substituindo as equações 8 e 3 na equação 2 ficamos com:

$$\Phi_{sg}(\vec{r}, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \Phi_{sg}(\vec{r}', 0) \frac{|z|}{(z^2 + |\vec{r} - \vec{r}'|^2)^{3/2}} d\vec{r}'. \quad (9)$$

A equação 9 foi deduzida considerando os eletrodos posicionados em $z = 0$. Mas em nosso sistema temos como posição $z = 0$ o 2DEG, de forma que os eletrodos estão posicionados em $z = b$. Desta forma temos que fazer $z \rightarrow z - b$ em 9. Fazendo isto ficamos com

$$\Phi_{sg}(\vec{r}, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \Phi_{sg}(\vec{r}', b) \frac{|z - b|}{\left[(z - b)^2 + |\vec{r} - \vec{r}'|^2 \right]^{3/2}} d\vec{r}'. \quad (10)$$

Como o ponto $z = b$ corresponde aos eletrodos, temos que $\Phi_{sg}(\vec{r}', b) = V_g$ e desta forma a equação 10 pode ser reescrita como

$$\Phi_{sg}(\vec{r}, z) = \frac{V_g}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{|z - b|}{\left[(z - b)^2 + |\vec{r} - \vec{r}'|^2 \right]^{3/2}} d\vec{r}', \quad (11)$$

$$\Phi_{sg}(\vec{r}, z) = \frac{V_g}{2\pi} \int_0^A \int_0^\infty \frac{|z-b|}{[(z-b)^2 + r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\theta - \theta')]^{3/2}} r' dr' d\theta', \quad (12)$$

onde A representa um ângulo qualquer. Notemos que a equação 12 é geral, isto é, descreve qualquer sistema com uma placa condutora na posição $z = b$. Desta forma, a solução para um sistema onde temos uma placa condutora cobrindo apenas metade do plano xy ($A = \pi$) é

$$\Phi_{sg}(\vec{r}, z) = \frac{V_g}{\pi} \left(\frac{\pi}{2} + \arctan \frac{y}{|z-b|} \right). \quad (13)$$

Para duas placas cobrindo a região $|y| > a/2$ (separação entre os eletrodos) teremos a seguinte condição

$$\Phi_{sg}(\vec{r}, b) = \begin{cases} 0 & \text{para } |y| < a/2 \\ V_g & \text{para } |y| > a/2 \end{cases} \quad (14)$$

Assim, podemos escrever a equação para o potencial $\Phi_{sg}(\vec{r}, z)$ como

$$\Phi_{sg}(\vec{r}, z) = V_g \left[1 - \frac{1}{\pi} \left(\arctan \frac{a/2 + y}{|z-b|} + \arctan \frac{a/2 - y}{|z-b|} \right) \right]. \quad (15)$$

Como queremos o potencial gerado pelos eletrodos no ponto $z = 0$ (onde se encontra o 2DEG) a equação 15 é dada por

$$\Phi_{sg}(\vec{r}, 0) = V_g \left[1 - \frac{1}{\pi} \left(\arctan \frac{a/2 + y}{b} + \arctan \frac{a/2 - y}{b} \right) \right]. \quad (16)$$

Esta é a equação do potencial de *split gate* $\Phi_{sg}(\vec{r}, 0)$ utilizado na equação 2.6 da seção 2.1.

Apêndice B

Potencial gerado pela camada de doadores

Neste apêndice determinamos o potencial gerado pela camada de doadores na posição do fio quântico utilizado na equação 2.7 da seção 2.1. Neste potencial levamos em conta também a indução de cargas nos eletrodos devido a esta camada e para isto usamos o método das imagens.

Para o sistema composto pela camada de doadores e os eletrodos (placa metálica infinita) o método das imagens nos diz que o potencial gerado por este sistema é o potencial gerado pela camada de doadores mais o potencial de uma camada de cargas com densidade $-n_d$ (sendo que n_d é a densidade de cargas dos doadores) a uma distância $b + c < z < b + c + d$, como representado pela figura B. 1.

Dividindo nosso sistema em três regiões (região 1: $z < b - c - d$; região 2: $b - c - d < z < b - c$; região 3: $b - c < z < b$) podemos escrever o potencial devido às duas camadas, a de doadores Φ_d e a de carga imagem Φ_{Id} , separadamente em cada região (figura B. 2). Já de início, sabemos que o potencial devido à carga imagem nas três regiões é dado pela solução da equação de Laplace

$$\nabla^2 \Phi_{Id}(z) = 0, \quad (17)$$

pois a densidade de cargas imagem n_{Id} nestas regiões é nula. Desta forma sabemos que o

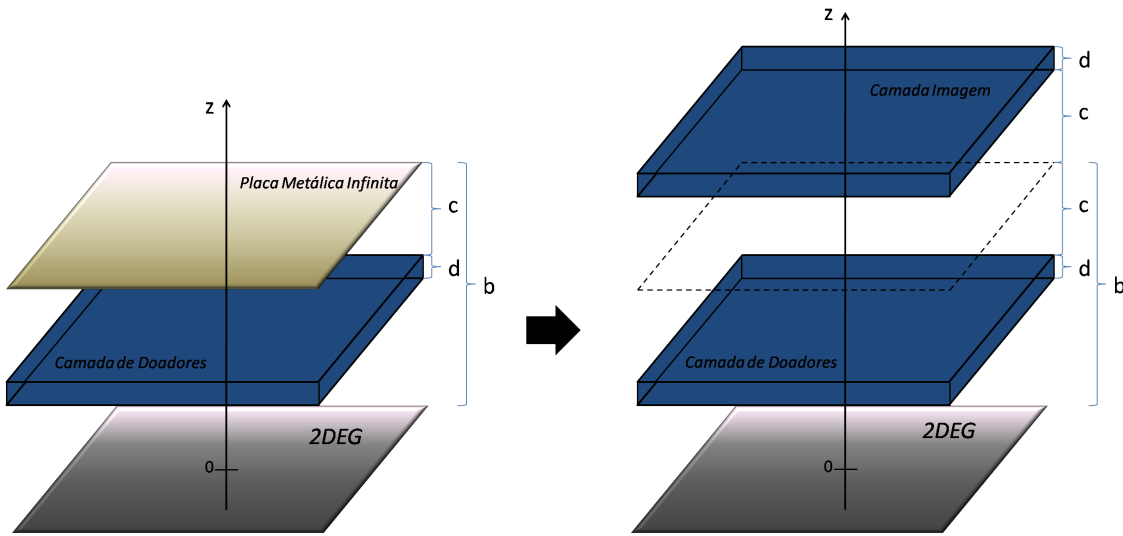


Figura B. 1 – Sistema composto por eletrodos (placa condutora infinita) e camada de doadores (com densidade de partículas n_d). O potencial gerado por este sistema é o potencial gerado pelo sistema formado pela camada de doadores e a camada imagem (com densidade de $-n_d$).

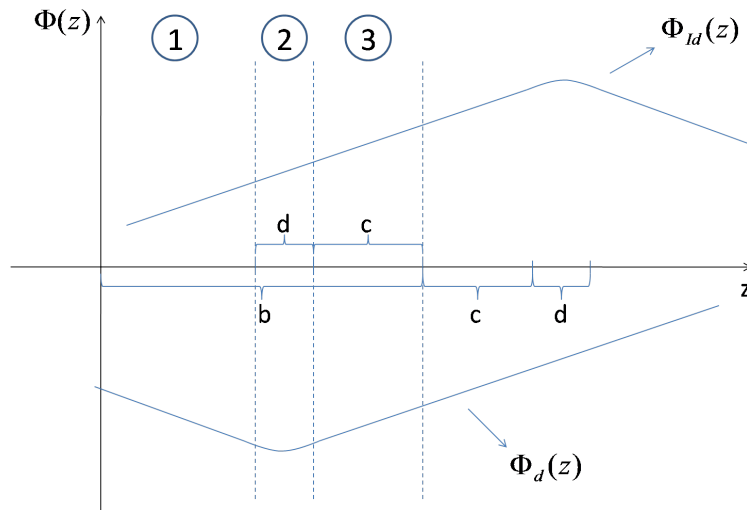


Figura B. 2 – Potenciais devido à camada de doadores $\Phi_d(z)$ e à camada imagem $\Phi_{Id}(z)$. É importante salientar que estamos interessados no potencial nas regiões 1, 2 e 3.

potencial $V_{Id}(z)$ nas três regiões é dado por

$$\Phi_{Id}(z) = A_{Id}z + B_{Id}. \quad (18)$$

onde A_{Id} e B_{Id} são constantes que determinadas quando aplicamos as condições de contorno em nosso problema.

Para o potencial Φ_d temos uma solução para cada região.

Região 1 ($z < b - c - d$) — Como nesta região não temos a presença de cargas, o potencial

Φ_d é dado pela equação de Laplace

$$\nabla^2 \Phi_d(z) = 0, \quad (19)$$

e desta forma temos

$$\Phi_d(z) = A_d z + B_d. \quad (20)$$

Com isto o potencial total na região 1 é

$$\Phi_d^{(1)}(z) = \underbrace{(A_d + A_{Id})}_A z + \underbrace{(B_d + B_{Id})}_B, \quad (21)$$

$$\Phi_d^{(1)}(z) = Az + B. \quad (22)$$

Região 2: $(b - c - d < z < b - c)$ — Nesta região temos a presença da camada com densidade de partículas n_d . O potencial nesta região é dado pela solução da equação de Poisson

$$\nabla^2 \Phi_d(z) = -\frac{en_d}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}. \quad (23)$$

Em nossa convenção $e > 0$. Resolvendo a equação 23 temos

$$\Phi_d(z) = -\frac{en_d}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r} z^2 + C_d. \quad (24)$$

Com isto o potencial na região 2 é

$$\Phi_d^{(2)}(z) = -\frac{en_d}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r} z^2 + A_{Id} z + \underbrace{(C_d + B_{Id})}_W, \quad (25)$$

$$\Phi_d^{(2)}(z) = -\frac{en_d}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r} z^2 + A_{Id} z + W. \quad (26)$$

Região 3: $(b - c < z < b)$ — Como na região 1, nesta região o potencial Φ_d é dado pela solução de Laplace

$$\Phi_d(z) = D_d z + E_d. \quad (27)$$

Com isto o potencial total na região 3 é

$$\Phi_d^{(3)}(z) = \underbrace{(D_d + A_{Id})}_P z + \underbrace{(E_d + B_{Id})}_Q, \quad (28)$$

$$\Phi_d^{(3)}(z) = Pz + Q. \quad (29)$$

O próximo passo é aplicar as condições de contorno nas equações 22, 26 e 29. A primeira condição de contorno é que $\Phi_d^{(3)}(b) = 0$ (b é a posição dos eletrodos, sendo assim escolhemos o potencial como sendo zero nesta posição). A partir desta condição temos

$$Pb + Q = 0. \quad (30)$$

Outra condição de contorno é que a derivada do potencial quando $z \rightarrow -\infty$ deve ser zero. Com isto, temos que $A = 0$. As condições de contorno restantes são que nas interfaces o potencial deve ser contínuo bem como sua derivada, ou seja

$$\Phi_d^{(1)}(b - c - d) = \Phi_d^{(2)}(b - c - d), \quad (31)$$

$$\left. \frac{d\Phi_d^{(1)}(z)}{dz} \right|_{z=b-c-d} = \left. \frac{d\Phi_d^{(2)}(z)}{dz} \right|_{z=b-c-d}, \quad (32)$$

$$\Phi_d^{(2)}(b - c) = \Phi_d^{(3)}(b - c), \quad (33)$$

$$\left. \frac{d\Phi_d^{(2)}(z)}{dz} \right|_{z=b-c} = \left. \frac{d\Phi_d^{(3)}(z)}{dz} \right|_{z=b-c}. \quad (34)$$

Sabendo que $A = 0$ e usando as relações (30) a (34) encontramos que

$$A_{Id} = \frac{en_d}{\varepsilon_0\varepsilon_r}(b - c - d), \quad (35)$$

$$P = -\frac{en_d}{\varepsilon_0\varepsilon_r}d, \quad (36)$$

$$Q = \frac{en_d}{\varepsilon_0\varepsilon_r}db, \quad (37)$$

$$W = \frac{en_d}{\varepsilon_0\varepsilon_r}db - \frac{en_d}{2\varepsilon_0\varepsilon_r}(b - c)^2, \quad (38)$$

$$B = \frac{en_d}{\varepsilon_0\varepsilon_r}d\left(c + \frac{d}{2}\right). \quad (39)$$

Como queremos saber o valor do potencial no ponto $z = 0$ (posição do fio quântico), ele será dado pelo potencial $\Phi_d^{(1)}(0)$ que é

$$\Phi_d^{(1)}(0) = \frac{en_d}{\varepsilon_0\varepsilon_r}d\left(c + \frac{d}{2}\right). \quad (40)$$

Esta é a equação 2.7 utilizada na seção 2.1 para o potencial gerado no fio quântico devido à camada de doadores e a carga induzida por ela nos eletrodos.

Apêndice C

Método da imagem para o cálculo do potencial de Hartree

Neste apêndice vamos deduzir a equação para o potencial de Hartree (equação 2.40) utilizada seção 2.2.4. Queremos descrever o potencial coulombiano em um ponto do espaço devido às cargas em um fio e às cargas induzidas por este fio nos eletrodos. Para simplificar nosso cálculo aproximamos os dois eletrodos por uma placa metálica infinita. Uma forma prática de se abordar este problema é utilizar o método das imagens*, ver figura C. 1.a. Este método tem como objetivo encontrar o conjunto de cargas fictícias (cargas imagem) que junto com as cargas atuais (fio quântico no nosso caso) satisfarão as condições de contorno e fornecerão a função do potencial eletrostático do problema real (fio quântico + gates).

Considerando uma certa quantidade de cargas dq do fio, como mostrado na figura C. 1.b, podemos escrever o potencial em um certo ponto (x, y, z) do espaço como

$$\begin{aligned} \Phi(x, y, z) = & \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{dq}{[(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2]^{1/2}} + \\ & + \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{dq'}{[(x - x'_0)^2 + (y - y'_0)^2 + (z - z'_0)^2]^{1/2}}, \end{aligned} \quad (41)$$

*Uma discussão completa do método das imagens pode ser encontrado no capítulo 2 da referência (39)

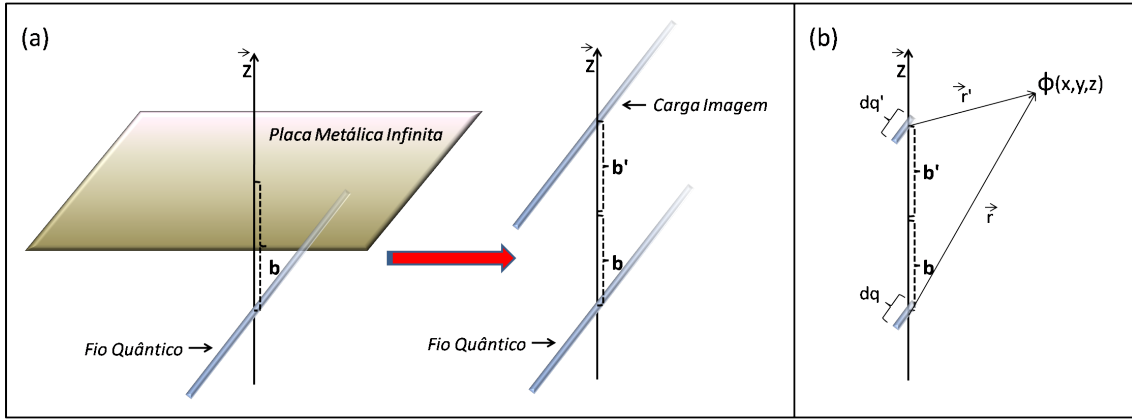


Figura C. 1 – a) Método da Imagem: se satisfizermos as condições de contorno de um sistema composto pelo fio quântico e uma placa metálica infinita, o potencial coulombiano deste sistema pode ser representado pelo potencial de um sistema composto por fio quântico e uma carga imagem situada em um ponto b' no eixo z . b) Potencial em um certo ponto (x, y, z) devido a uma certa quantidade de cargas dq do fio e dq' da carga imagem.

onde o segundo termo deve-se às cargas imagem. Temos que satisfazer a condição de contorno $\Phi(x, y, b) = 0$ em (41), portanto

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \left\{ \frac{dq}{[(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (b-z_0)^2]^{1/2}} + \frac{dq'}{[(x-x'_0)^2 + (y-y'_0)^2 + (b-z'_0)^2]^{1/2}} \right\} = 0. \quad (42)$$

Escolhendo a origem do sistema de coordenadas no fio temos $z_0 = 0$ e $z'_0 = b + b'$, então

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \left\{ \frac{dq}{[(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + b^2]^{1/2}} + \frac{dq'}{[(x-x'_0)^2 + (y-y'_0)^2 + b'^2]^{1/2}} \right\} = 0. \quad (43)$$

Para satisfizermos a equação 43 devemos ter que $dq = -dq'$, $x_0 = x'_0$, $y_0 = y'_0$ e $b = b'$.

Reescrevendo 41 ficamos com

$$\Phi(x, y, z) = \frac{dq}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \left\{ \frac{1}{[(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + z^2]^{1/2}} - \frac{1}{[(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-2b)^2]^{1/2}} \right\}. \quad (44)$$

Este é o potencial coulombiano no ponto (x, y, z) devido a uma porção de carga infinitesimal dq (levando em conta as cargas imagem). Para obtermos o potencial devido ao fio

por inteiro fazemos

$$\begin{aligned} \Phi(x, y, z) = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(x_0, y_0)}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \left\{ \frac{1}{[(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + z^2]^{1/2}} \right\} dx_0 dy_0 + \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(x_0, y_0)}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \left\{ \frac{1}{[(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-2b)^2]^{1/2}} \right\} dx_0 dy_0. \end{aligned} \quad (45)$$

onde usamos $dq = \rho(x_0, y_0)dx_0dy_0$. Sendo assim, o potencial de Hartree quântico para o nosso caso é nada mais que a equação 45 calculada na posição do fio ($z = 0$),

$$v_H(x, y) = e\Phi(x, y, z = 0), \quad (46)$$

$$\begin{aligned} v_H(x, y) = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^2 n(x_0, y_0)}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \left\{ \frac{1}{[(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2]^{1/2}} \right\} dx_0 dy_0 + \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^2 n(x_0, y_0)}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \left\{ \frac{1}{[(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + 4b^2]^{1/2}} \right\} dx_0 dy_0, \end{aligned} \quad (47)$$

onde usamos $\rho(x_0, y_0) = en(x_0, y_0)$, sendo $n(x_0, y_0)$ a densidade de partículas 2D que é calculada através da equação 2.37. Como o fio é infinito na direção x , sabemos que $n(x_0, y_0) = n(y_0)$, ou seja, a densidade 2D depende apenas da variável y_0 . Desta forma, integrando (47) em x_0 ficamos com

$$v_H(y) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \int_{-\infty}^{\infty} n(y_0) \ln \left[\frac{(y-y_0)^2}{(y-y_0)^2 + 4b^2} \right] dy_0 \quad (48)$$

Esta é a equação para o potencial de Hartree dada pela equação 2.40 da seção 2.2.4.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)